

UNIVERSITÀ DI PISA
FACOLTÀ DI INGEGNERIA
CORSO DI LAUREA IN INGEGNERIA ELETTRONICA

Tesi:
**Simulazione di Quantum Dot in Silicio
per Applicazioni Spintroniche**

Relatori:

Prof. Giuseppe Iannaccone

Prof. Massimo Macucci

Ing. Gianluca Fiori

Candidato:

Michele Lisieri

ANNO ACCADEMICO 2004-2005

*Un giorno un angelo mi donò un sogno,
quel sogno oggi vivo,
domani sognerò ancora
perchè quell'angelo sopra me vola.
Ciao mamma.*

Ringraziamenti

Un ringraziamento particolare va al Prof. Ianna e all' Ing. Gianluca Flowers per il loro prezioso aiuto.

Un ringraziamento speciale va al mio migliore amico, col quale in questi anni ho condiviso momenti belli e brutti, e che soprattutto ha saputo ascoltare nel momento in cui avevo bisogno di parlare. Grazie Papà.

Un ringraziamento va a mia Nonna Vittorina e a mia Zia Luci per il loro immenso amore. Grazie di avermi fatto sentire un pò ogni giorno in Sardegna.

Un ringraziamento va a tutti i miei amici di avventure coi quali ho condiviso la vita universitaria. Se sono quel che sono lo devo a loro (non sò se è un bene o un male però.....).

Grazie a tutti.....

A mio Fratello.

Indice

1	Dispositivi a singolo elettrone	11
1.1	Il Quantum Dot	11
1.2	L'Approccio Teorico	13
1.3	Single Electron Box	16
1.4	Coulomb Blockade	18
1.5	Single Electron Transistor	24
2	Spintronica	30
2.1	Lo Spin	31
2.2	Spin Blockade	34
3	Modelli fisici	39
3.1	Il modello Semiclassico	39
3.1.1	Densità di Stati	39
3.1.2	Densità di carica	40
3.1.3	Convenzioni	41
3.1.4	Equazione di Poisson	42
3.1.5	Condizioni al contorno	42
3.2	Il modello quantistico	43
3.2.1	Equazione di Schrödinger	43
3.2.2	Condizioni al contorno	44
3.2.3	DFT	44
3.2.4	CSDFA	46
3.2.5	Termine di Exchange	48

3.3	Regola di Slater	53
4	Il Simulatore	55
4.1	Il Box Integration	55
4.2	Discretizzazione delle equazioni	57
4.3	QDCAD	59
4.3.1	Metodo ad un punto Newton-Raphson	66
5	Simulazione di quantum dot	
	in Silicio in campo magnetico	68
5.1	Geometria e drogaggi del dispositivo.	68
5.2	Risultati delle simulazioni	70
6	Simulazione del Nonoverlapped-MOS	
	a canale ultra corto	77
6.1	Geometrie e drogaggi	77
6.2	L'esperimento	80
6.3	Risultati delle simulazioni	82
A	I file di ingresso	92
B	Codici per il calcolo dei potenziali di XC secondo la formulazione di Koskinen	99
	Elenco delle Figure	108
	Bibliografia	111

Introduzione

L'insaziabile necessità di risorse computazionali, di maggiore velocità dei dispositivi e di minore dissipazione di potenza, spinge la ricerca nel mondo delle tecnologie dei semiconduttori. I progressi tecnologici nel campo dei dispositivi a semiconduttore consentono oggi di indagare in modo più approfondito e dettagliato alcuni fenomeni visibili solo su scala nanometrica. Attualmente però, la letteratura è priva di studi su quantum dot in silicio; e per questo motivo che ci siamo spinti in questo lavoro di tesi.

Oggi la spintronica è presente con dispositivi come le MRAM (Magnetic Ram), oppure con le Giant Magnetic Resistance, utilizzate nelle testine di lettura degli hard disk.

La spintronica studia la possibilità di manipolare il grado di libertà degli Spin dei singoli elettroni. In sostanza, studiamo i dispositivi a singolo elettrone immersi nel campo magnetico. La nostra ricerca si basa sulla possibilità di sfruttare il Si come materiale per i dispositivi nano-spintronici.

Il primo capitolo ci introduce nel mondo dei dispositivi a singolo elettrone. Diamo il dettaglio fisico dei due basilari dispositivi: il *Single electron Box* e il *Single Electron Transistor*.

Nel secondo capitolo ci attrezziamo degli strumenti fisico-matematici per affrontare lo studio dei SED sotto l'azione del campo magnetico. In partico-

lare introduciamo lo Spin e l'effetto Zeeman.

Il terzo capitolo espone il modello fisico implementato dal nostro simulatore. Studiamo in particolare la Current Spin Density Functional Theory, attraverso la quale è possibile risolvere iterativamente l'equazione di Schrödinger, e soprattutto studiamo i dispositivi nanometrici immersi in campo magnetico.

Il quarto capitolo discute il dettaglio circa il modo in cui il modello fisico esposto nel terzo capitolo possa essere implementato su un calcolatore.

Nel quinto capitolo presentiamo una semplice simulazione di un quantum dot di silicio dalle dimensioni 6x6x6 nm sotto l'azione del campo magnetico.

Nel sesto capitolo proponiamo un'interessante simulazioni di un MOS a canale ultracorto (lunghezza di canale pari a 16 nm) sotto l'azione del campo magnetico.

Capitolo 1

Dispositivi a singolo elettrone

I dispositivi a singolo elettrone sono oggetto di rilevante interesse dell'elettronica dei dispositivi nanometrici. La possibilità di avere dispositivi più piccoli, più veloci e che consumino una minore potenza, è una appetibile opportunità che non può essere trascurata.

Un pioniere in questo campo è il noto **Kostantin Likharev**[10].

1.1 Il Quantum Dot

La teoria si basa sulla possibilità di manipolare elettroni singoli. Già **Millikan** all'inizio del secolo condusse esperimenti di questo tipo, ma solo agli inizi degli anni ottanta si effettuarono esperimenti in circuiti a stato solido. L'ostacolo principale è la *riproducibilità* di dispositivi dell'ordine del nm. Si pensi che parliamo di oggetti la cui dimensione caratteristica è di 10nm.

Nella figura 1.1 mostriamo una sfera metallica di dimensioni nanometriche (*metallic island* MI). Alla sfera inizialmente priva di carica, viene addizionato un elettrone che porta la carica netta a $-q$. Supponendo che l'isola abbia un raggio di circa di 10nm, si manifesta un campo elettrico di ≈ 140 KV/cm. Addizionando un secondo elettrone incontreremo l'ostacolo del campo prodotto dal primo. Come conseguenza di questo campo abbia-

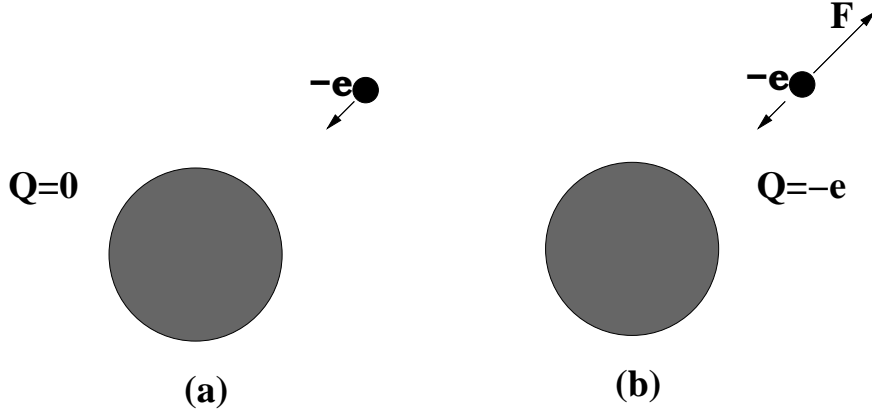


Figura 1.1: In a e b mostriamo prima e dopo l'inserimento di un elettrone nell'isola metallica

mo la *charging energy* (CE), ovvero l'energia che dobbiamo spendere per aggiungere un elettrone all'isola quando la carica iniziale è pari a $-q$:

$$E_c = \frac{q}{2C} [eV]$$

dove C è la capacità dell'isola.

Se le dimensioni dell'isola sono paragonabili alla lunghezza d'onda di *de Broglie* (la lunghezza d'onda di de Broglie è $\lambda = \frac{h}{k}$), emergono effetti quantistici che portano alla variazione della CE, che sono presi in considerazione tramite la *Kinetic Energy* E_k :

$$E_a = E_c + E_k \quad (1.1)$$

Dalla figura 1.2 osserviamo l'andamento della CE e delle sue costituenti. Il caso di interesse pratico vuole che $E_a \approx E_c$ (Infatti la E_k è parecchio sensibile nei confronti della dimensione d_i , questo condurrebbe ad un dispositivo con caratteristiche elettriche estremamente sensibili rispetto al processo), e questo si verifica se il diametro dell'isola $d_i \gg 3.16nm$.

La condizione espressa sopra impone un limite inferiore alle dimensioni

dell'isola. Un limite superiore è invece espresso dall'agitazione termica. Infatti, deve essere verificato:

$$E_a \geq 10K_b T.$$

dove K_b è la costante di Boltzmann.

Questo significa che a $T=300K$ d_i deve essere inferiore a 10nm. In realtà nelle applicazioni digitali si richiede $E_a \geq 100K_b$, e questo porterebbe un $d_i \leq 1nm$. Osserviamo che in questo range $E_k \simeq E_c$ e questo conduce alla definizione di *Quantum Dot*:

Dal punto di vista pratico definiamo Quantum Dot (QM) una Metallic Island talmente piccola per cui $E_c \simeq E_k$.

1.2 L'Approccio Teorico

La fenomenologia fisica è sviluppata dalla *Orthodox Theory* da I. O. Kulik[9].

Essa presuppone:

- All'interno dei conduttori si assume $E_k \ll k_b T$;
- Si considera trascurabile il tempo di transito degli elettroni attraverso le barriere;
- Non si considera il *Cotunneling*, che è equivalente alla condizione $R \gg R_Q$, $R_Q = h/4q^2 \simeq 6.5K\Omega$

Intendiamo con *Cotunneling* l'attraversamento simultaneo di elettroni attraverso le barriere tunnel.

Per quanto riguarda il *Cotunneling* sappiamo che esso cresce con $(R_Q/R)^{N-1}$. Dove con N abbiamo indicato il numero di elettroni che transitano contemporaneamente attraverso la barriera.

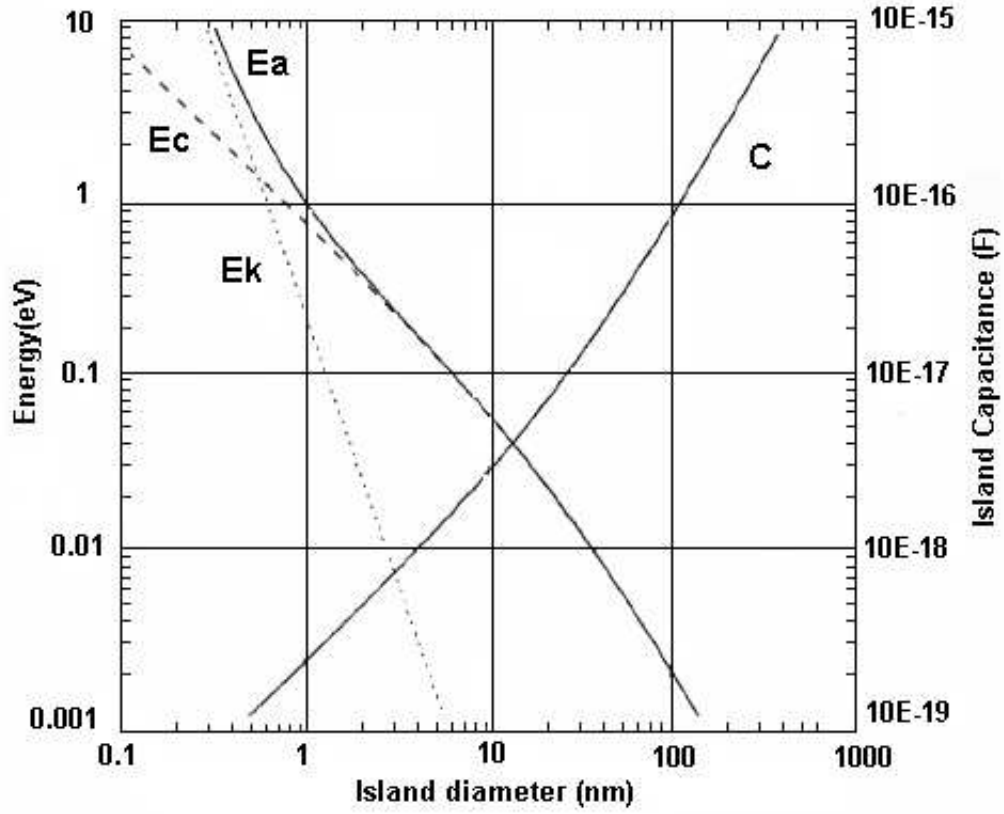


Figura 1.2: Confronto tra l'energia E_a (tratto continuo), l'energia E_c (tratteggiato) e l'energia E_k (punteggiato); La capacità dell'isola C è riportata a tratto continuo. Estrapoliamo la lunghezza d_i , ottenuta rilevando l'ascissa alla quale $E_k \simeq E_c$. Fig 2 in [10]

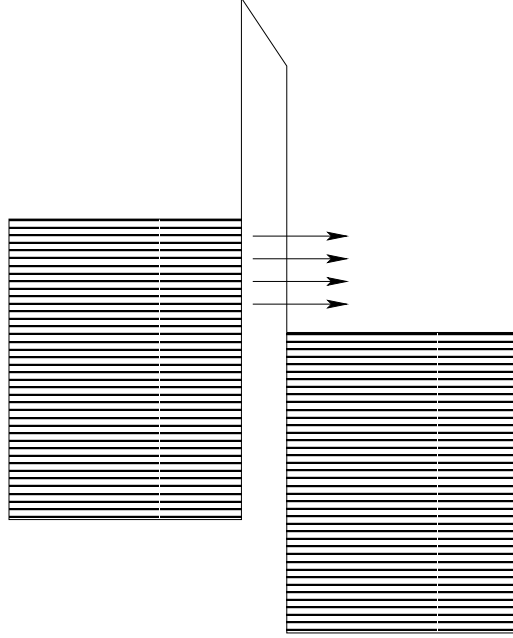


Figura 1.3: Diagramma a bande di una barriera di potenziale rettangolare che separa due elettrodi metallici.

L'importante risultato di questa teoria è la probabilità di attraversamento sull'unità di tempo:

$$\Gamma(\Delta W) = \left[\frac{1}{q} I\left(\frac{\Delta W}{q}\right) \right] \frac{1}{1 - e^{-\frac{\Delta W}{K_b T}}}. \quad (1.2)$$

dove:

$$\Delta W = e \frac{V_i + V_f}{2}$$

e V_i e V_f sono i potenziali iniziali e finali nei quali si trova immerso l'elettrone. L'argomento fra quadre nella 1.2 è la corrente di probabilità attraverso una barriera tunnel in assenza dell'effetto dovuto alla CE.

Il fattore $[1 - \exp\{-\Delta W/K_b T\}]^{-1}$ tiene conto del comportamento di singolo elettrone.

In realtà nel caso di interesse pratico, non possiamo trascurare la E_k . La 1.4 mostra un modello a bande più realistico, dove si osserva un andamento discreto dei livelli di energia del QD.

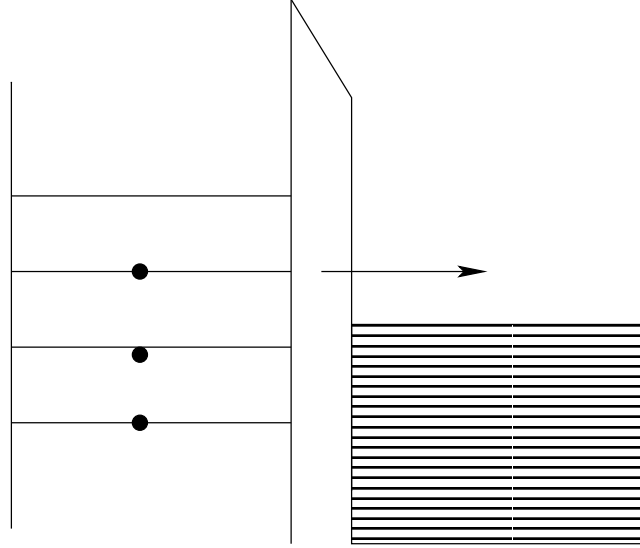


Figura 1.4: Diagramma a bande di energia tra Dot e contatto metallico nel quale sono ben visibili i livelli di energia discreti.

In questo caso la 1.2 non è più valida, ma se supponiamo $\hbar\Gamma_0 < K_bT$ allora vale:

$$\Gamma(\Delta W) = \Gamma_o \frac{1}{1 + e^{-\frac{\Delta W}{K_B T}}} \quad (1.3)$$

1.3 Single Electron Box

In 1.5 presentiamo un *Single Electron Box*. Chiamiamo con C_o la capacità tra la MI e l'elettrodo di gate, mentre C_Σ la capacità totale della MI includente la C_o . L'energia immagazzinata in questo sistema è:

$$W = \frac{Q^2}{2C_\Sigma} + \frac{C_o}{C_\Sigma}QU + const \quad (1.4)$$

dove $Q = -ne$, ossia la carica intrappolata nel cristallo.

Definendo :

$$Q_e = C_o U$$

la 1.4 diventa:

$$W = \frac{(ne - Q_e)^2}{2C_\Sigma} + const \quad (1.5)$$

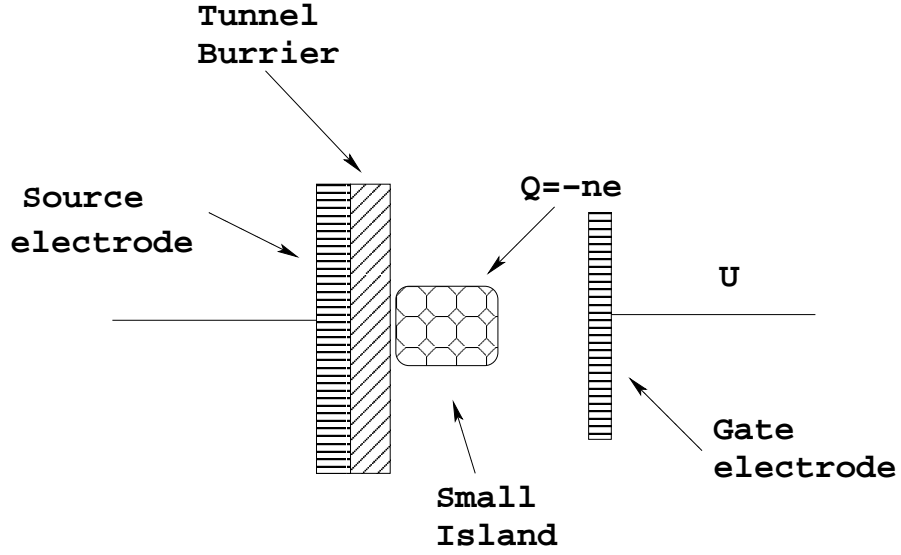


Figura 1.5: Single Electron Box

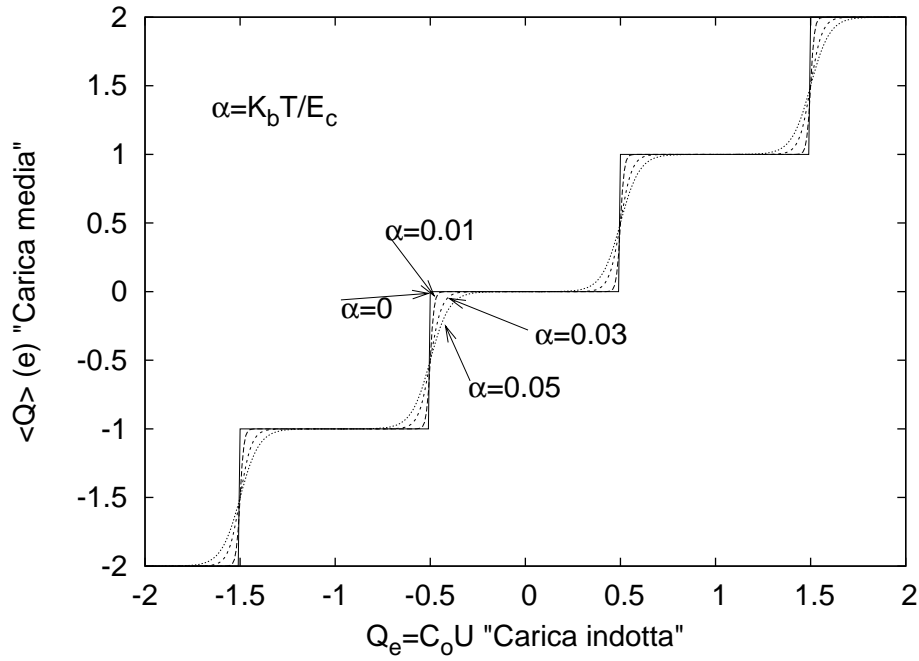


Figura 1.6: Andamento carica netta nella MI ottenuto dall'interpolazione della fig. 5 in [10]

Nella 1.6 riportiamo l'andamento della carica della MI in funzione della tensione di gate U . La tensione di gate provoca la variazione del *potenziale elettrochimico*. Il potenziale elettrochimico è una caratteristica essenziale dei QD, ed esprime l'energia necessaria per aggiungere un elettrone nel cristallo. Salvo specificazioni esso sarà espresso in eV . quando la configurazione energetica è favorevole, un elettrone può essere scambiato tra l'elettrodo di massa e la MI. Il fenomeno appena descritto viene detto *Coulomb Blockade* (CB). Tratteremo più avanti il dettaglio della fenomenologia del CB. Per il momento limitiamoci ad osservare che all'aumentare del rapporto k_bT/E_c le curve tanto più si discostano dall'andamento a gradino.

Questo dispositivo pur collocandosi come mattoncino basilare dei dispositivi a singolo elettrone, non ha alcuna importanza applicativa. I motivi sono due:

- Non può immagazzinare nessuna informazione.
- In esso non può scorrere nessuna corrente.

Il primo punto è giustificato dal fatto che la carica sul cristallo è unica funzione della tensione di gate U , ed evidentemente al cessare della tensione di gate la carica netta fugge dal cristallo per effetto tunnel.

1.4 Coulomb Blockade

In figura 1.7 presentiamo una MI accoppiata a due conduttori metallici. Le MI possono essere propriamente metalliche o di semiconduttore. Nel primo caso la concentrazione di elettroni è molto maggiore che nel secondo.

Quando un elettrone salta dal conduttore metallico all'isola, o viceversa, si ha una redistribuzione di carica elettrica all'interno del dot. Ne consegue la variazione del potenziale elettrochimico (EP). In strutture più larghe questo

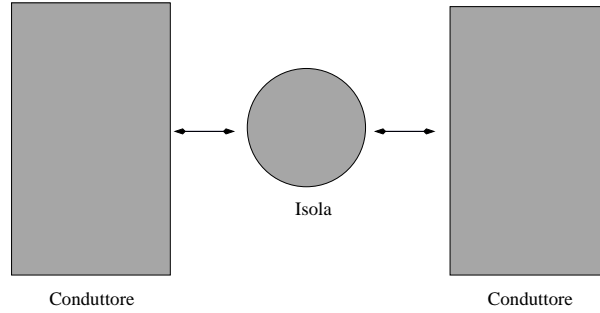


Figura 1.7: Quantum Dot accoppiato a due conduttori metallici

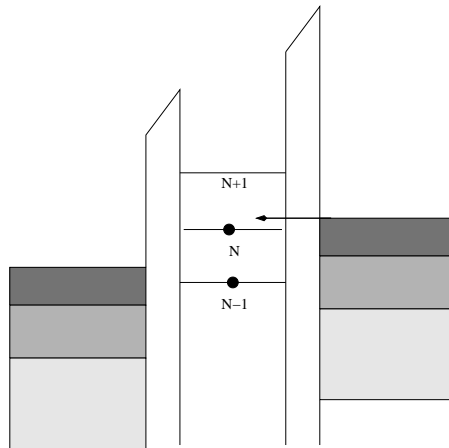


Figura 1.8: Diagramma a bande del Quantum Dot.

porta al fenomeno del rumore *Shot*, mentre nel nostro caso darà vita al CB. Se la variazione è più piccola di $K_b T$ il fenomeno sarà ben visibile.

Il CB è studiato con successo con modelli a parametri concentrati. Sappiamo che se prendiamo un metallo, esiste una relazione tra il potenziale e la carica:

$$Q = CV$$

Ricordiamo che la capacità dipende dalla geometria fisica del sistema. Se noi variassimo il potenziale varierebbe di conseguenza la carica sulla superficie

dell'isola, e viceversa. L'energia di configurazione associata al sistema metallo è data:

$$E = \frac{Q^2}{2C}$$

Bisogna fare attenzione che la carica Q è una carica di configurazione imposta dalle tensioni elettriche applicate. Se la tensione venisse annullata la carica Q svanirebbe con essa.

Prendiamo il caso di un elettrone che salta sull'isola metallica, avremo un'energia di configurazione pari a :

$$E = \frac{e^2}{2C}$$

Ora non si tratta più di una carica di configurazione, ma di carica addizionale al conduttore metallico. Questo implica che la MI ha una carica netta pari all'elettrone e .

Il problema si complica quando prendiamo in esame isole di semiconduttori, inoltre nella pratica lavoriamo prevalentemente con Dot di questo materiale, e il motivo è che le tecniche di fabbricazione di un Dot di semiconduttore sono meno complicate. Per queste non è più implicito parlare di capacità; il rapporto Q/V non è più lineare. Però potremmo definire una capacità sul punto di lavoro:

$$C(V') = \left. \frac{\partial Q}{\partial V} \right|_{V'} \quad (1.6)$$

dove V' è il punto attorno al quale si vuole linearizzare la curva di capacità. Grazie alla relazione 1.6 possiamo lavorare con un modello a parametri concentrati anche per QD di semiconduttore. Stiamo attenti che però alcune proprietà fisiche sono fortemente differenti. Ad esempio, la superficie di un metallo è equipotenziale, mentre quella del semiconduttore no.

Consideriamo la (1.6). Ad essa possiamo associare il circuito equivalente:

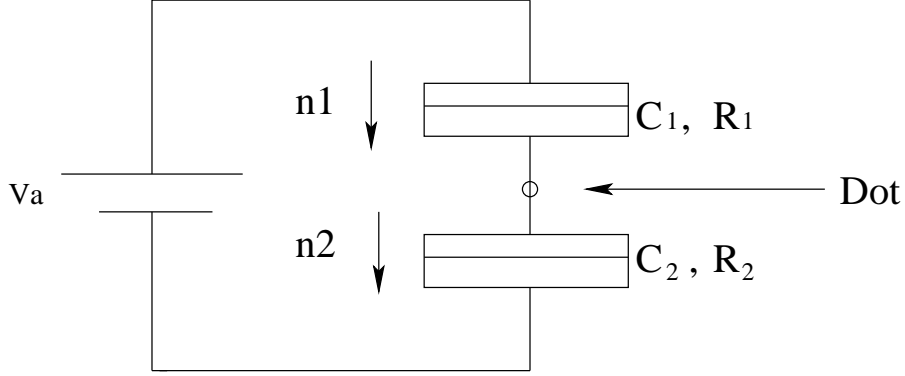


Figura 1.9: Modello a parametri concentrati del QD di 1.8

La carica netta sul QD è:

$$\begin{aligned}
 Q_1 &= C_1 V_1, \\
 Q_2 &= C_2 V_2, \\
 n &= n_2 - n_1 \\
 Q = Q_2 - Q_1 &= -ne = -(n_2 - n_1)e.
 \end{aligned} \tag{1.7}$$

dove indichiamo con n il numero di elettroni sull'isola; con n_1 e n_2 gli elettroni transitati rispettivamente attraverso la barriera 1 e 2, Q_1 e Q_2 la carica accumulate rispettivamente nell'elettrodo di gate e nell'elettrodo di source; C_1 e C_2 le capacità rispettivamente della barriera tunnel 1 e 2; e con R_1 e R_2 le resistenze rispettivamente delle barriere tunnel 1 e 2.

Combinando le 1.7 si ricavano le tensioni ai capi delle capacità:

$$\begin{aligned}
 V_1 &= \frac{1}{C_{eq}}(C_2 V_a + ne) \\
 V_2 &= \frac{1}{C_{eq}}(C_1 V_a - ne).
 \end{aligned} \tag{1.8}$$

dove $C_{eq} = C_1 + C_2$ è la capacità serie. Mentre l'energia immagazzinata dalle due capacità è data dall'espressione:

$$E_s = \frac{Q_1^2}{2C_1} + \frac{Q_2^2}{2C_2} = \frac{1}{2C_{eq}}(C_1 C_2 V_a^2 + Q^2). \tag{1.9}$$

A questo punto ci resta da calcolare l'energia spesa dal generatore W_s per costruire la configurazione di carica. Sappiamo che:

$$W_s = \int V_a I(t) dt = V_a \Delta Q \quad (1.10)$$

L'ultima espressione nella 1.10 è valida se la tensione ai capi del generatore resta costante. Calcoliamo la carica ΔQ facendo il seguente ragionamento: supponiamo che attraverso la seconda barriera transiti un elettrone, di conseguenza $n_2 \mapsto n_2 + 1$. Dalle 1.8 emerge un aumento della tensione V_2 che deve essere bilanciato da una uguale variazione di segno opposto della V_1 . Per ottenere questo il generatore eroga una carica pari a $\Delta Q(n_2) = -eC_1/C_{eq}$. Ma questa carica transita per ognuna delle n_2 cariche, ne consegue:

$$W_s^{n_2} = -n_2 e V_a \frac{C_1}{C_{eq}} \quad (1.11)$$

Un analogo ragionamento fatto per le n_1 particelle ci conduce:

$$W_s^{n_1} = -n_1 e V_a \frac{C_2}{C_{eq}} \quad (1.12)$$

Sommando le 1.11 e 1.12:

$$W_s = \frac{eV_a}{C_{eq}} (C_1 n_2 + C_2 n_1) \quad (1.13)$$

A questo punto conosciamo l'energia totale del sistema:

$$E(n_1, n_2) = E_s - W_s = \frac{1}{2C_{eq}} (C_1 C_2 V_a^2 + Q^2) + \frac{eV_a}{C_{eq}} (C_1 n_2 + C_2 n_1) \quad (1.14)$$

Il nostro sistema è chiuso; per il secondo principio della termodinamica, qualunque cambiamento di stato è permesso se la variazione di energia $\Delta E \leq 0$ ¹.

Supponiamo che il sistema si trovi in uno stato (n_1, n_2) e supponiamo di variare $n_1 \mapsto n_1 + 1$ e $n_2 \mapsto n_2 + 1$ alla volta, ottenendo:

$$\Delta E_1^\pm = E(n_1, n_2) - E(n_1, n_2 \pm 1)$$

¹Consideriamo: $\Delta E = E_{fin} - E_{in}$

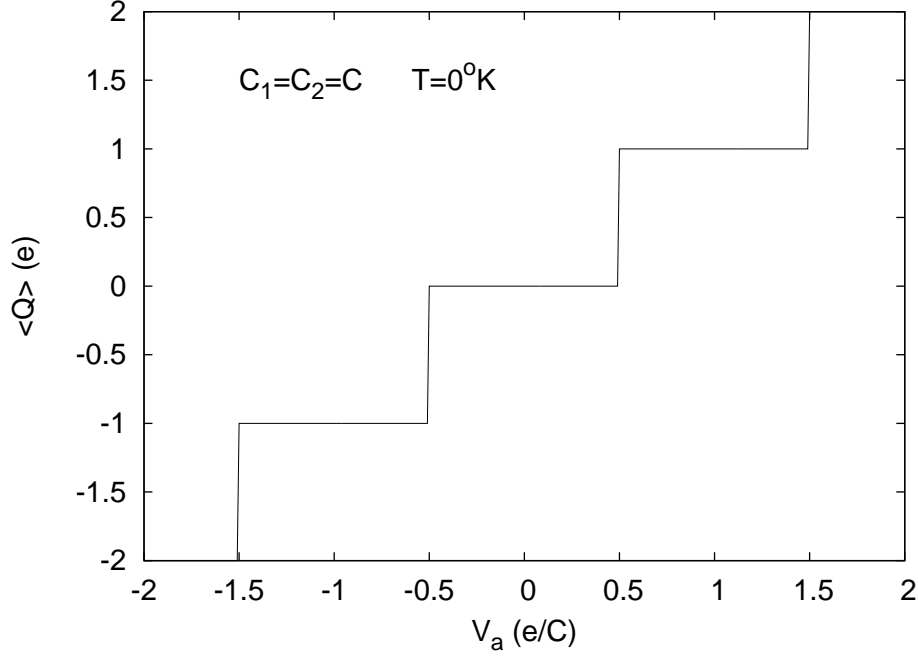


Figura 1.10: Andamento teorico della carica sul Dot nell'ipotesi $C_1 = C_2 = C$ e $T = 0^{\circ}K$.

$$\begin{aligned}
 &= \frac{Q^2}{2C_{eq}} - \frac{(Q \pm e)^2}{2C_{eq}} \mp \frac{eV_a C_2}{C_{eq}} \\
 &= \frac{e}{C_{eq}} \left[-\frac{e}{2} \mp (en + V_a C_2) \right]
 \end{aligned} \tag{1.15}$$

In modo analogo:

$$\begin{aligned}
 \Delta E_2^{\pm} &= E(n_1, n_2) - E(n_1 \pm 1, n_2) \\
 &= \frac{e}{C_{eq}} \left[-\frac{e}{2} \pm (en - V_a C_1) \right]
 \end{aligned} \tag{1.16}$$

Supponiamo che inizialmente l'isola sia scarica ($n=0$), scrivendo in modo compatto:

$$\Delta E_{1,2}^{\pm} = -\frac{e^2}{2C_{eq}} \mp \frac{eV_a C_{2,1}}{C_{eq}} > 0 \tag{1.17}$$

In figura 1.10 riportiamo l'andamento della carica sul dot. Questo prende il nome di *Coulomb Staircase* (CS), ed è in accordo con la relazione 1.17. La relazione 1.17 giustifica quantitativamente la fenomenologia reale del CS.

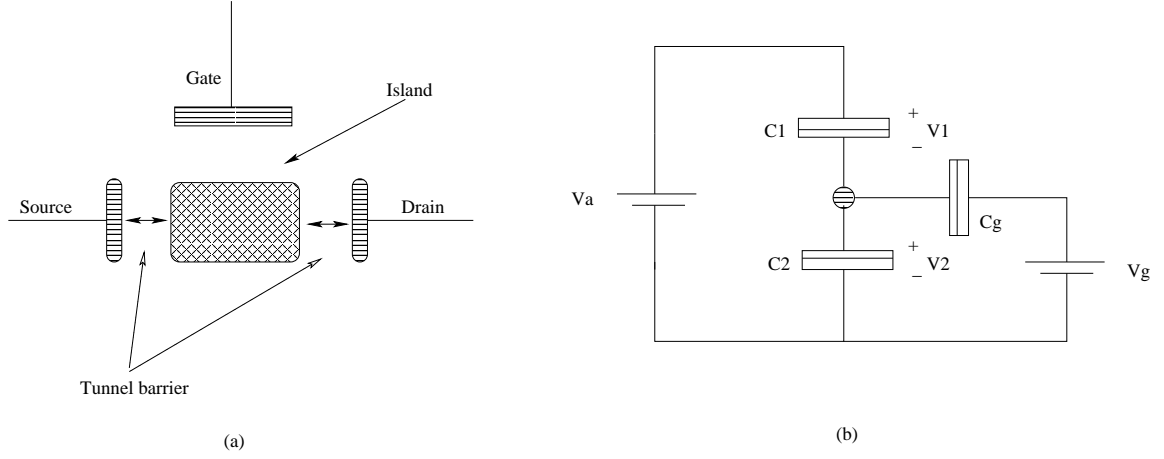


Figura 1.11: SET: In a modello fisico, mentre in b circuito a parametri concentrati

1.5 Single Electron Transistor

Il transistor a singolo elettrone (SET) riveste un'importanza centrale nello studio dei *single electron devices*. In 1.11 (a) mostriamo il modello fisico, mentre in 1.11 (b) mostriamo il corrispondente modello a parametri concentrati di un SET.

Variando la tensione sull'elettrodo di gate produciamo la variazione del potenziale elettrochimico dell'isola. Ne consegue la possibilità di variare lo stato di conduzione del transistor.

Seguendo la stessa procedura fatta per il CS in 1.4 perveniamo alle seguenti relazioni:

$$\begin{aligned}\Delta E_1^\pm &= \frac{e}{C_{eq}} \left(-\frac{e}{2} \mp [en - Q_p + (C_g + C_2)V_a - C_g V_g] \right), \\ \Delta E_2^\pm &= \frac{e}{C_{eq}} \left(-\frac{e}{2} \pm [en - C_1 V_a - C_g V_g] \right).\end{aligned}\quad (1.18)$$

Dove:

$$\begin{aligned}Q_g &= C_g(V_g - V_2) \\ Q &= Q_2 - Q_1 - Q_g = -ne\end{aligned}$$

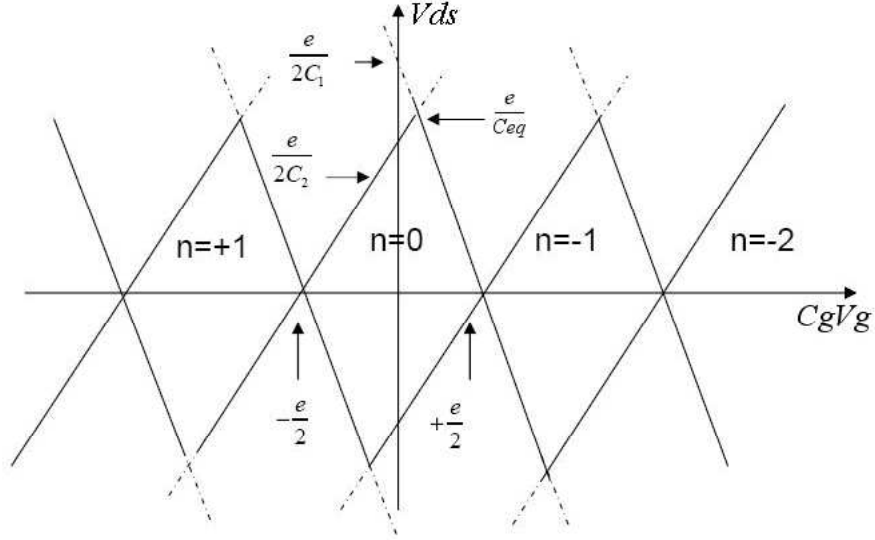


Figura 1.12: Diamond Diagram. Fig. 6 [10]

$$V_1 = \frac{1}{C_{eq}} [(C_g + C_2)V_a - C_g V_g + ne]$$

$$V_2 = \frac{1}{C_{eq}} [C_1 V_a + C_g V_g - ne]$$

Considerando il sistema chiuso, anche per il SET devono valere le diseuguaglianze per l'energia:

$$\begin{aligned} -\frac{e}{2} \mp [en + (C_g + C_2)V_a - C_g V_g] &> 0 \\ -\frac{e}{2} \pm [en - C_1 V_a - C_g V_g] &> 0 \end{aligned} \quad (1.19)$$

Nella 1.12 mostriamo l'andamento teorico del *Diamond Diagram* (DD), ossia il grafico delle 1.19. Le zone interne ai rombi sono di stabilità, ossia per nessuna coppia dei valori V_a, V_g è possibile provocare un tunnelling attraverso una delle due barriere, ovvero, il transistor si trova in una condizione di CB. Nelle zone esterne ai rombi, al contrario, si possono avere eventi tunnel sulle due giunzioni, ovvero il transistor conduce.

Mentre in figura 1.13 mostriamo l'andamento reale dello DD.

Dalla 1.12 si può estrapolare la tensione di soglia del transistor, ossia fissata una certa tensione V_a determiniamo la tensione V_g per la quale il

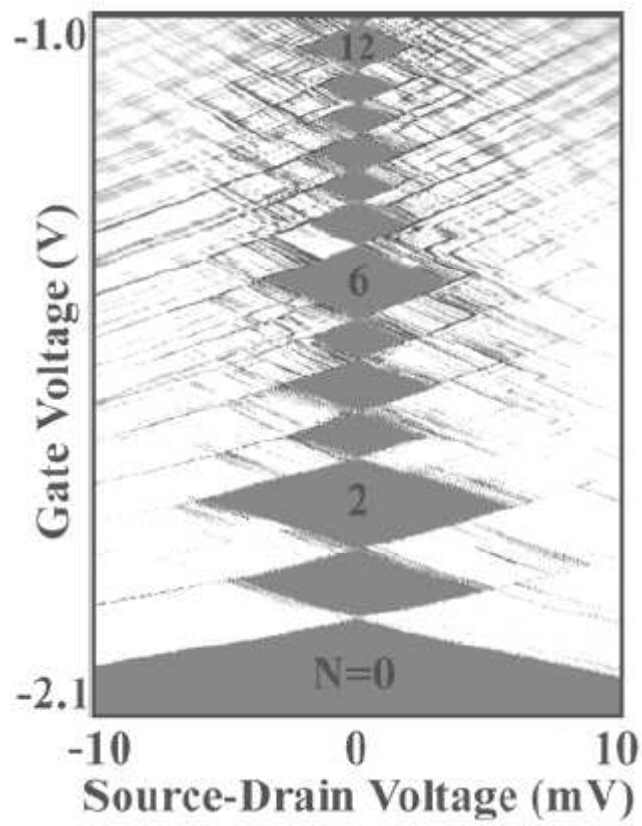


Figura 1.13: Andamento sperimentale delle Diamond Diagramm. Fig. 5 in [7].

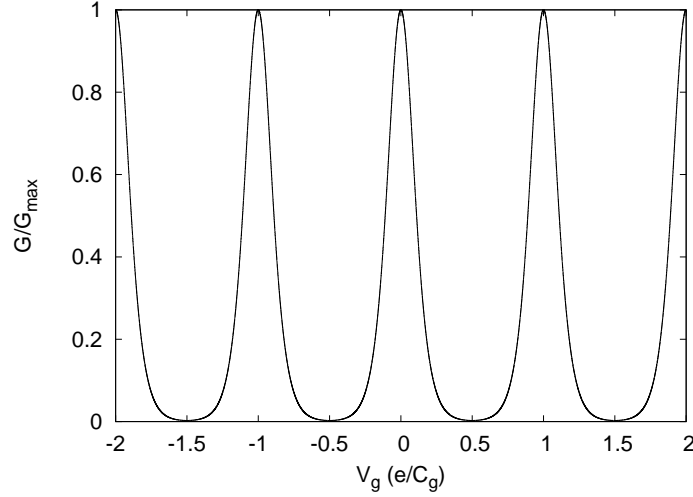


Figura 1.14: Oscillazioni del *Coulomb Blockade* considerando $K_b T = 0.05e^2/C_{eq}$.

transistore conduce. Tracciando una retta sul 1.12 a $CV_a = 0.2$ (Q) scopriamo un insieme di tensioni di soglia periodico. Questo comportamento è tipico dei dispositivi a singolo elettrone.

In [1] è presentato lo studio delle oscillazioni del CB. In particolare è ottenuta l'espressione della conduttanza:

$$\frac{G}{G_{max}} = \frac{\frac{\Delta_{min}}{K_b T}}{\sinh(\frac{\Delta_{min}}{K_b T})} \simeq \cosh^{-2} \left(\frac{\Delta_{min}}{2.5 K_b T} \right) \quad (1.20)$$

dove:

$$\Delta_{min} = \frac{\frac{eC_g}{C_{eq}} \left(\frac{ne}{C_g} - V_g \right)}{2.5 K_b T}$$

Nella 1.14 riportiamo l'andamento teorico delle oscillazioni del CB.

L'andamento della conduttanza può essere qualitativamente compreso analizzando i diagrammi a bande di energia. Infatti come osserviamo dalla 1.15 il minimo di G si ha quando non sono disponibili livelli del dot con energia compresa tra i livelli di fermi di source e di drain. Mentre, il massimo di G si ha quando il PE del dot disponibile per la conduzione ha valore pari

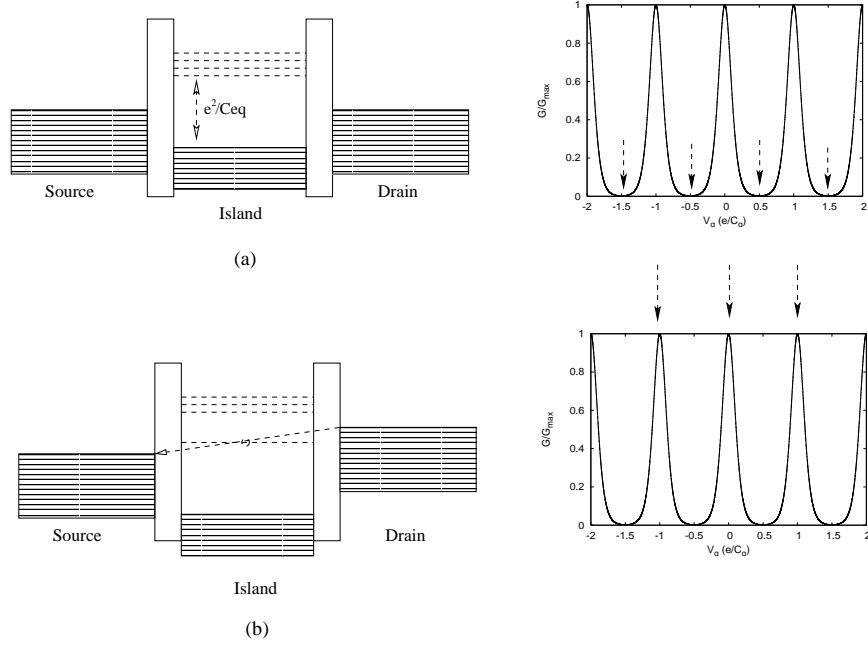


Figura 1.15: In a presentiamo la configurazione del diagramma a bande per la quale si presenta il CB, mentre in b mostriamo la condizione energetica favorevole alla conduzione attraverso il dot

alla media tra il livello di source e di drain. (Questa viene detta regola d'oro di Fermi).

Nella 1.16 mostriamo le caratteristiche sperimentali del SET: La $|V_t|$ assume il suo valore massimo quando $Q_e = 0$, ossia quando la tensione applicata al gate è nulla. Questo perché bisogna applicare una maggiore V_{ds} affinché il livello di Fermi del drain sia maggiore dell'energia del primo stato libero del dot, come evidenziato dalla figura 1.17 (a). Aumentando la tensione di gate l'EP del dot si abbassa, finché si pone ad un livello intermedio tra i livelli di Fermi di source e di drain. Questa è il motivo per cui anche per $|V_{ds}|$ molto piccole il transistor conduce ed assume una caratteristica lineare, come evidenziato nella figura 1.17.

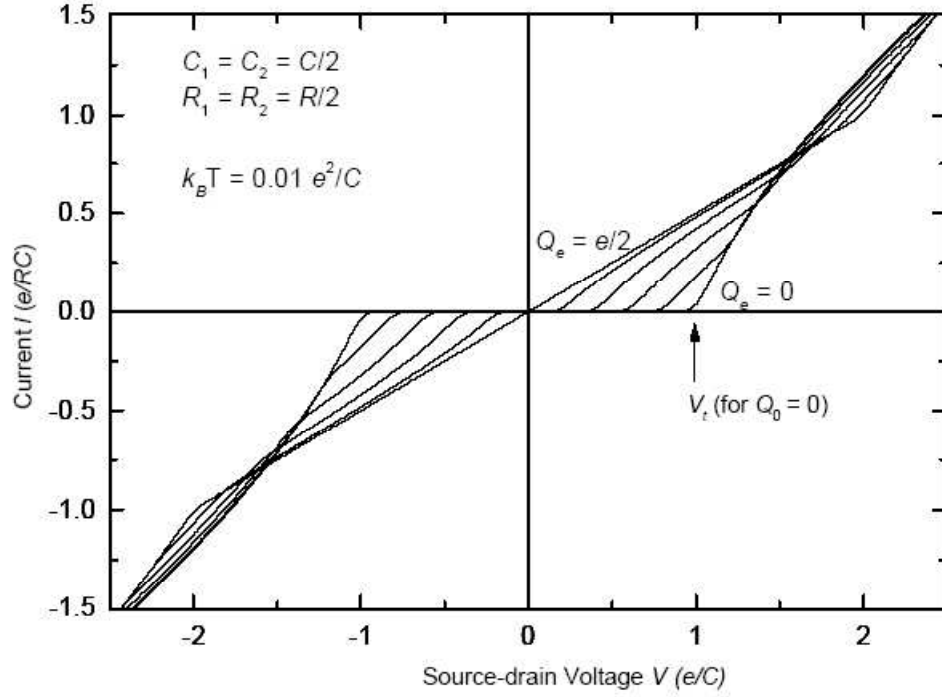


Figura 1.16: Caratteristiche I/V del Single Electron Transistor [10]

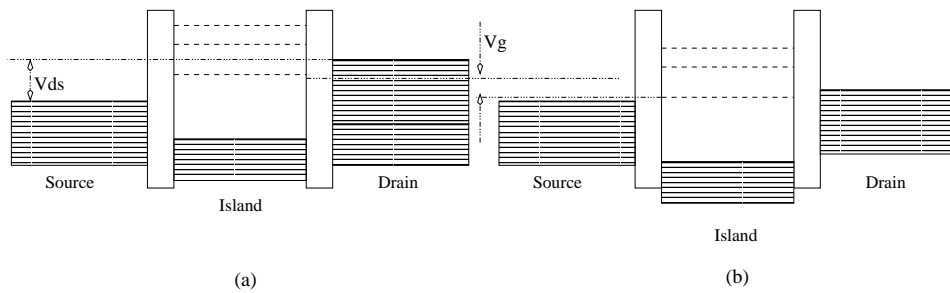


Figura 1.17: In (a) mostriamo come con V_{gs} nulla occorre una elevata V_{ds} perchè il transistor conduca, mentre in (b) mostriamo come applicando una opportuna tensione V_g sul gate il transistore possa condurre anche con $V_{ds} \simeq 0$

Capitolo 2

Spintronica

La Spintronica, o meglio l'Elettronica dello Spin, coinvolge lo studio del controllo attivo e della manipolazione del grado di libertà di Spin nei sistemi a stato solido. I punti focali sui quali si concentra la ricerca sono la generazione di carica con polarizzazione di spin, la dinamica dello spin, e il trasporto attraverso semiconduttori e metalli.

La principale prospettiva risiede nella possibilità di creare dispositivi a bassissima dispersione di calore; attualmente questo problema non consente di superare certi limiti sia in termini di densità che in termini di velocità.

Gli Spin Devices trovano in campo digitale una collocazione ottimale. L'informazione è memorizzata nello spin degli elettroni, trasportata attraverso fili, e letta da opportuni dispositivi. Il bit memorizzato sullo spin degli elettroni è propriamente detto **qbit**.

2.1 Lo Spin

Consideriamo un elettrone che ruota attorno al nucleo. Supponendo esso percorra un'orbita circolare, produrrà una corrente pari a[14]:

$$i = -\frac{e}{T} = -\frac{ev}{2\pi r} \quad (2.1)$$

dove v è la velocità dell'elettrone, r è il raggio dell'orbita e T è il tempo impiegato dall'elettrone per percorrere l'orbita.

La corrente i produce il momento di dipolo magnetico:

$$\mu_l = iA = \frac{ev}{2\pi r} \pi r^2 = \frac{evr}{2} \quad (2.2)$$

L'elettrone è dotato anche di momento angolare:

$$L = mvr \quad (2.3)$$

Facendo il rapporto tra la 2.1 e la 2.3:

$$\frac{\mu_l}{L} \triangleq \frac{g_l \mu_b}{\hbar} = \frac{e}{2m} \quad (2.4)$$

dove g_l è il fattore orbitale mentre μ_b è il magnetone di Bohr. Se consideriamo $g_l = 1$ si ha $\mu_l = 0.927 \cdot 10^{-23} [A \cdot m^2]$.

Dalla meccanica quantistica sappiamo che:

$$L = \sqrt{l(l+1)}\hbar \quad (2.5)$$

da cui ricaviamo la:

$$\mu_l = g_l \mu_l \sqrt{l(l+1)} \quad (2.6)$$

mentre per la componente z :

$$\mu_{l_z} = -g_l \mu_b m_l \quad (2.7)$$

dove

- $n=0, 1, 2, 3, \dots$
- $l=0, 1, 2, \dots, n-1$

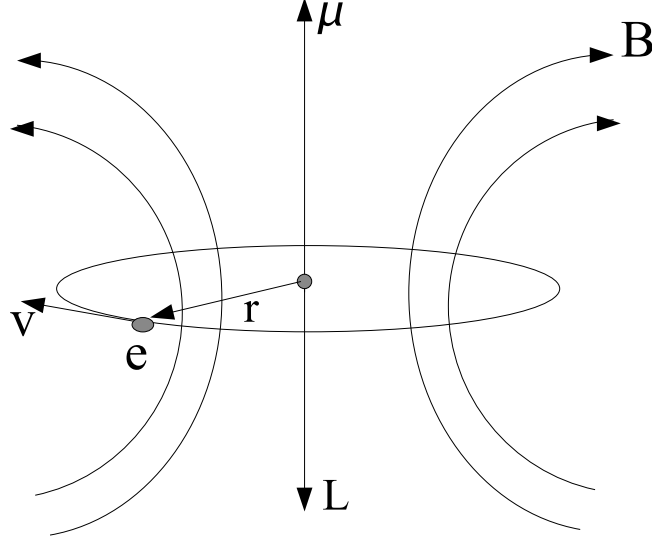


Figura 2.1: Momento angolare e momento di dipolo magnetico μ_l dell'elettrone che gira su un'orbita circolare.

- $m_l = -l, -l + 1, \dots, l - 1, l$

Supponendo di applicare un campo lungo z , la particella sarà soggetta ad una forza:

$$F_z = \frac{\partial B_z}{\partial z} \mu_{l_z} \quad (2.8)$$

A questo punto abbiamo tutti gli elementi per introdurre lo spin grazie all'esperimento di **Stern-Gerlach**, che nel 1922 eseguirono un esperimento come in 2.2.

Prendiamo una sorgente che emetta atomi H. Attraverso il collimatore il fascio è focalizzato e accelerato verso lo schermo. Successivamente gli atomi passano in un regione dove persiste un campo magnetico B_z . Infine, il pennello di atomi incide su una lastra sulla quale forma particolari geometrie.

In base alla meccanica classica il risultato sullo schermo dovrebbe essere una figura continua-compatta costruita considerando tutti i valori possibili tra $-\mu_{l_z}, \dots, +\mu_{l_z}$. La meccanica quantistica, invece, dice che il momento μ_{l_z}

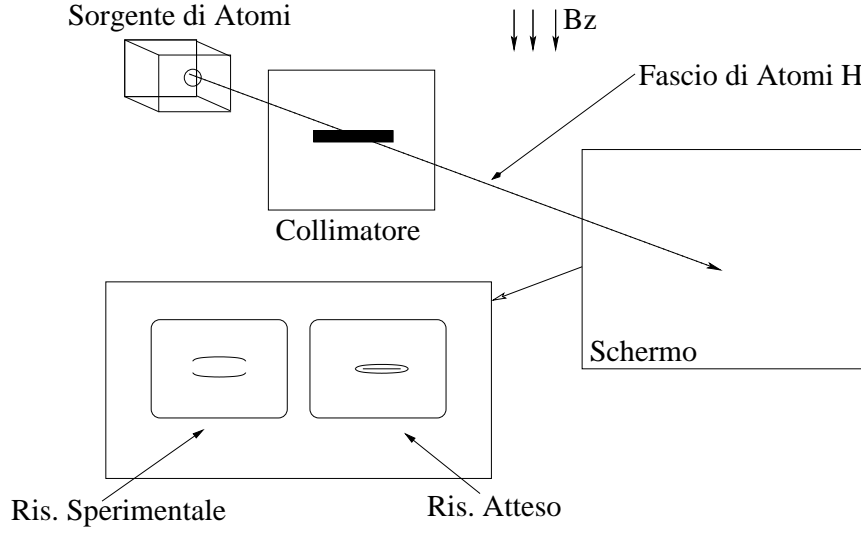


Figura 2.2: Esperimento di Stern-Gerlach

è quantizzato, e questo spiega perchè sullo schermo la figura è costituita da righe. Però per l'atomo di H il valore di l dovrebbe essere nullo, quindi sullo schermo dovrebbe osservarsi una sola riga centrale priva di curvatura.

Al contrario, il dato sperimentale mostra due righe con curvatura opposta, simmetriche rispetto ad una linea centrale ma nettamente spostate dal centro. Questa contraddizione si supera se introduciamo il momento angolare di spin:

$$S = \sqrt{s(s+1)}\hbar \quad (2.9)$$

$$S_z = m_s \hbar \quad (2.10)$$

ed in modo analogo:

$$\mu_s = -\frac{g_s \mu_b}{\hbar} S \quad (2.11)$$

$$\mu_{s_z} = -g_s \mu_b m_s \quad (2.12)$$

dove g_s è il fattore giromagnetico di spin. I due numeri quantici di spin possono assumere i valori:

$$s = \frac{1}{2}$$

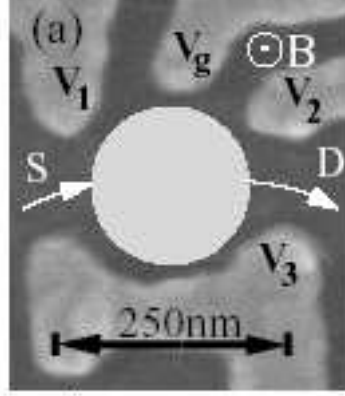


Figura 2.3: SEM del dispositivo sotto misura. Il dispositivo è costituito da una eterostruttura GaAs/AlGaAs sulla quale vengono applicati gli elettrodi di confinamento V1, V2 e V3; è visibile inoltre l'elettrodo di gate. Fig. 1c [2]

$$m_s = -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \quad (2.13)$$

A questo punto la forza è data dall'espressione:

$$F_z = \frac{\partial B_z}{\partial z} \mu_b g_s m_s \quad (2.14)$$

L'energia della particella subisce una variazione in seguito all'iterazione col campo magnetico:

$$\Delta E = -\mu_s \cdot B = -\mu_{sz} B_z = \pm g_s \mu_b \frac{b}{2} \quad (2.15)$$

Questa importante relazione spiega quantitativamente il fenomeno **Zee-man**. Il fenomeno Zeeman è ben visibile nello studio di emissione degli atomi posti sotto l'azione di un campo magnetico. Esso si manifesta con lo sdoppiamento dello spettro delle righe di emissione.

2.2 Spin Blockade

Consideriamo la fig:2.3 nella quale presentiamo il dispositivo sotto esperimento. Esso è costituito da una eterostruttura GaAs/AlGaAs, sulla cui

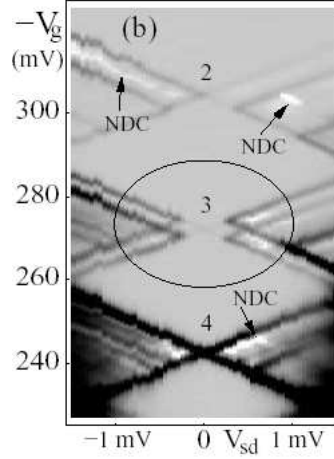


Figura 2.4: Misura della conduttanza di un QD: Zone bianca conduttanza nulla, zone nere conduttanza significativa, zone grigie a conduttanza negativa. Fig. 1a [2].

superficie applichiamo gli elettrodi di confinamento V_1 , V_2 e V_3 ; All' interfaccia dell'eterostruttura si forma un gas 2DEG di elettroni, e tramite gli elettrodi di confinamento formiamo il dot. Applichiamo una piccola tensione V_{ds} , e variando la tensione sul gate sperimentiamo il potenziale elettrochimico del Dot. A tutto questo, aggiungiamo un campo magnetico applicato ortogonalmente al piano della figura in direzione uscente. Questa appena descritta è una tipica misura spettrografica della conduttanza.

In letteratura si trovano menzionati due tipi di Spin Blockade [2]. Nella fig:2.4 riportiamo i risultati sperimentali ottenuti dal dispositivo di fig:2.3. Variando la V_{gs} e lavorando con $V_{ds} \simeq 0$ osserviamo le tipiche oscillazioni periodiche dovute al CB. Poniamoci a $V_{gs} \simeq 280$ [mV], notiamo che per V_{ds} relativamente piccole la conduttanza risulta nulla (le zone chiare in 2.4 sono a conduttanza nulla). Questo è il fenomeno dello *Spin Blockade di secondo tipo* (SB). Infatti noi ci aspettavamo una conduttanza piccola ma non nulla.

Al contrario, all'interno dei rombi del Diamond Diagramm di fig:2.4

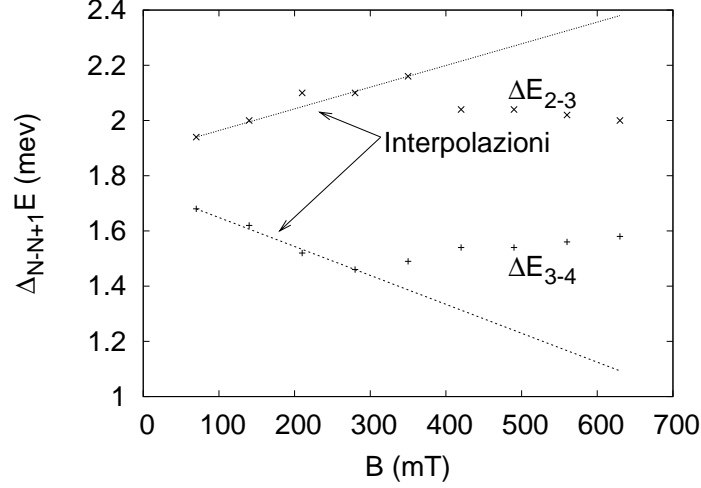


Figura 2.5: Misura della variazione della Charging Energy (Δ_{N-N+1}) al variare del campo magnetico applicato ortogonalmente al struttura laterale. Dati prelevati da [2]

notiamo zone bianche a conduttanza negativa (NDC). Questo fenomeno è chiamato *Spin Blockade di primo tipo*.

Cerchiamo meglio di capire quale può essere la causa dello spin blockade di secondo tipo. Nella 2.6 mostriamo il contorno dei rombi di figura 2.4. I rombi subiscono sia una traslazione in orizzontale che in verticale: questo fenomeno può essere causato direttamente dall'effetto *Zeeman*. Lo sdoppiamento dei rombi è particolarmente visibile nella 2.7, dove osserviamo che le linee si allontanano mutuamente all'aumentare del campo magnetico applicato.

Lo Spin Blockade di tipo 2 invece è presente nelle zone a conduttanza negativa interne alle zone di stabilità delle diamond diagramm (zone con colorazione bianca). Dall'analisi dei dati sperimentali, lo spin blockade di tipo 2 si verifica quando nel passare da $N \rightarrow N + 1$ elettroni in un sistema al ground state si verifica:

$$\Delta S = S_{n+1} - S_N > \frac{1}{2} \quad (2.16)$$

dove abbiamo indicato con S lo spin totale del dot. Quest'ultima è nota in

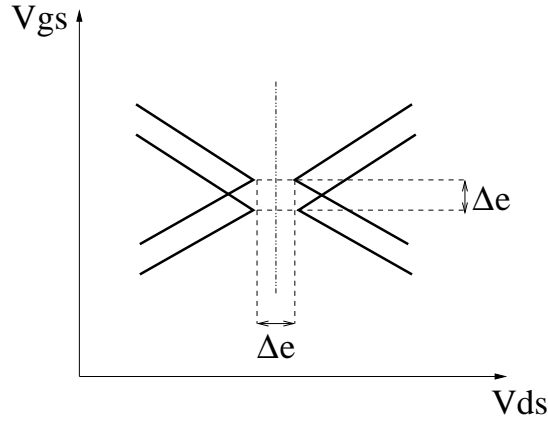


Figura 2.6: Effetto Zeeman sui rombi del Diamond Diagram, visibile sia sullo shift verticale che sullo shift orizzontale.

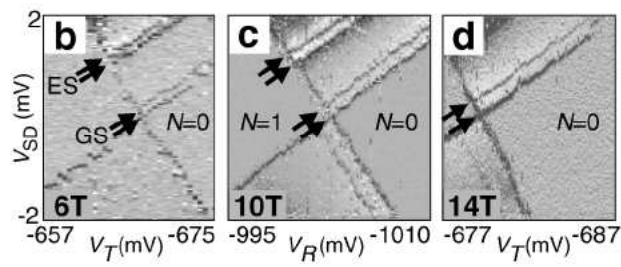


Figura 2.7: Misure di conduttanza di Dot, nella zona di frontiera tra $N = 0$ e $N = 1$ elettroni. All'aumentare del campo magnetico le righe scure a conduttanza significativa si allontanano [4].

letteratura come *regola di selezione dello spin*.

Capitolo 3

Modelli fisici

Lo studio dei dispositivi nanometrici richiede una descrizione fisica quantistica. In questo capitolo daremo il dettaglio delle equazioni che regolano il modello.

3.1 Il modello Semiclassico

3.1.1 Densità di Stati

Consideriamo un semiconduttore all'equilibrio termodinamico. Il nostro obiettivo è valutare la densità di stati sull'unità di energia. Per il momento consideriamo un cubetto di spigolo L costituito da materiale semiconduttore con relazione di dispersione parabolica $E(k)$ ma a simmetria sferica. Sappiamo valgono le seguenti quantizzazioni per la quantità di moto:

$$p_x = \frac{n_x h}{L}, \quad p_y = \frac{n_y h}{L}, \quad p_z = \frac{n_z h}{L}. \quad (3.1)$$

dove $n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3, \dots$. Consideriamo nello spazio reciproco una calotta sferica di sezione dp e raggio p che avrà un volume pari a $4\pi p^2 dp$, se dividiamo per il volume del cubo avremo:

$$dN_c(p) = \frac{8\pi L^3 p^2}{h^3} dp \quad (3.2)$$

perndiamo la banda di conduzione E_c come livello di riferimento delle energie, quindi possiamo scrivere:

$$p = \sqrt{2m_n^*(E - E_c)} \quad (3.3)$$

dove con m_n^* e m_h^* indichiamo rispettivamente la massa efficace degli elettroni in banda di conduzione e delle lacune in banda di valenza. Sostituendo la 3.3 nella 3.2, sapendo che il $dp = \frac{m_{n,h}^*}{p} dE$ e rapportando sul dE si ha:

$$\begin{aligned} g_c(E) &= \frac{4\pi}{h^3} (2m_n^*)^{3/2} \sqrt{E - E_c} \\ g_v(E) &= \frac{4\pi}{h^3} (2m_h^*)^{3/2} \sqrt{E_v - E} \end{aligned} \quad (3.4)$$

Il caso appena discusso ben si applica agli elettroni del GaAs, che in banda di conduzione presenta un solo minimo a simmetria sferica. Il caso del silicio è più complicato. Infatti esso presenta 6 minimi e soprattutto la massa è anisotropa. Per risolvere la degenerazione dei minimi basterà moltiplicare la densità di stati per il numero M_C dei minimi. Calcoli analoghi al caso precedente ma eseguiti prendendo superfici a equienergia non sferiche portano al seguente risultato:

$$m_n^* = (m_x^* m_y^* m_z^*)^{1/3} M_C^{2/3} \quad (3.5)$$

dove con m_x^*, m_y^*, m_z^* indichiamo la massa efficace degli elettroni nelle rispettive direzioni. Nel caso del silicio abbiamo due masse uguali dette trasversali m_t^* e una diversa detta longitudinale m_l^* . Quindi avremo:

$$m_n^* = 6^{2/3} (m_{nl}^*)^{1/3} (m_{nt}^*)^{2/3} \quad (3.6)$$

3.1.2 Densità di carica

Nota la densità di stati in banda di conduzione, siamo in grado di calcolare la densità di elettroni. Infatti, conoscendo il fattore di occupazione di ogni singolo stato:

$$f(E, E_f) = \frac{1}{1 + e^{\frac{E - E_f}{K_b T}}} \quad (3.7)$$

moltiplicando la 3.7 per la 3.4 e integrando si ha:

$$n(r) = \int_{E_c}^{+\infty} g_c(r, E) f(r, E) dE \quad (3.8)$$

sviluppando i calcoli e tenendo presente che $E_c - E_f \gg K_b T$ si giunge alle densità di carica per elettroni e lacune:

$$\begin{aligned} n(r) &= N_c \exp\left(\frac{E_f - E_c}{K_b T}\right) \\ p(r) &= N_v \exp\left(\frac{E_v - E_f}{K_b T}\right) \end{aligned} \quad (3.9)$$

dove abbiamo indicato con N_c, N_v le densità efficaci di stati in banda di conduzione e valenza date da:

$$\begin{aligned} N_c &= 2 \frac{(2\pi m_n^* K_b T)^{\frac{3}{2}}}{h^3} M_c \\ N_v &= 2 \frac{(2\pi m_h^* K_b T)^{\frac{3}{2}}}{h^3} M_c \end{aligned} \quad (3.10)$$

3.1.3 Convenzioni

Dobbiamo fissare i livelli di riferimento delle energie e dei potenziali. Per fare questo numeriamo i gate, e del primo di questi consideriamo il potenziale e il livello di fermi come riferimenti rispettivamente dei potenziali e delle energie. Quindi il livello del vuoto è dato dall'espressione:

$$E_0(r) = \chi_{m1} + E_{f1} - q\phi(r)$$

dove abbiamo indicato con χ_{m1} l'affinità elettronica del gate 1. Possiamo esprimere banda di conduzione e di valenza nel seguente modo:

$$E_c(r) = \chi_{m1} + E_{f1} - \chi(r) - q\phi(r)$$

$$E_v(r) = E_c(r) - E_{gap}(r)$$

3.1.4 Equazione di Poisson

L'equazione di Poisson è:

$$\nabla \cdot \epsilon(\mathbf{r}) \nabla \phi(\mathbf{r}) = -\rho \quad (3.11)$$

Dove abbiamo indicato con $\epsilon(\mathbf{r})$ la matrice delle permittività dielettriche:

$$\epsilon(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \epsilon_{11} & \epsilon_{12} & \epsilon_{13} \\ \epsilon_{21} & \epsilon_{22} & \epsilon_{23} \\ \epsilon_{31} & \epsilon_{32} & \epsilon_{33} \end{pmatrix}$$

e con ρ intendiamo la densità di carica che è data dall'espressione:

$$\rho(\mathbf{r}) = q [p(\mathbf{r}) - n(\mathbf{r}) + N_D^+(\mathbf{r}) - N_A^+(\mathbf{r})] + \rho_{fissa}$$

dove con $N_D^+(\mathbf{r})$, $N_A^-(\mathbf{r})$ intendiamo la concentrazione di atomi donatori e accettori ionizzati, la cui concentrazione può essere espressa dalle:

$$N_D^+(\mathbf{r}) = \frac{N_D(\mathbf{r})}{1 + g_D \exp\left(\frac{E_f - E_D(\mathbf{r})}{K_b T}\right)}, g_D = 2$$

$$N_A^-(\mathbf{r}) = \frac{N_A(\mathbf{r})}{1 + g_A \exp\left(\frac{E_f - E_A(\mathbf{r})}{K_b T}\right)}, g_A = 2$$

Emerge che ρ è una funzione del potenziale, e quindi l'equazione 3.11 in realtà un problema autoconsistente:

3.1.5 Condizioni al contorno

[5] Al fine di trovare il corretto potenziale che risolve il nostro problema, dobbiamo imporre le condizioni al contorno che possono essere:

- * Di Neumann: si impone il valore del campo elettrico nella regione di frontiera, ossia nelle superfici esterne del dispositivo.
- * Di Dirichlet: si impongono il valore del potenziale nella regione di frontiera.
- * Condizioni miste: ossia su alcuni conduttori si impongono le condizioni di Dirichlet mentre nei restanti si impongono le condizioni di Neumann.

3.2 Il modello quantistico

3.2.1 Equazione di Schrödinger

In presenza di forti confinamenti siamo costretti a ricorrere allo studio quantistico del sistema, ossia dobbiamo risolvere l'equazione di *Schrödinger*, che per una particella sottoposta ad un potenziale $V(\mathbf{r})$ (nel caso di una sola particella $V(\mathbf{r}) \equiv E_c(\mathbf{r})$):

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \nabla \cdot \left(\frac{1}{m} \nabla \right) + V(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r}) \quad (3.12)$$

dove:

$$\frac{1}{m} = \begin{pmatrix} m_x^{-1} & 0 & 0 \\ 0 & m_y^{-1} & 0 \\ 0 & 0 & m_z^{-1} \end{pmatrix}$$

I problemi con i quali dobbiamo lavorare coinvolgono sistemi con più di un elettrone (in letteratura vengono spesso chiamati *Many Body Problem*). Consideriamo l'equazione di S. scritta per un solido[8]:

$$\left\{ -\frac{\hbar}{2} \sum_j \nabla_j \frac{1}{m} \nabla_j - \sum_{i,j} \frac{Z_l e^2}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{R}_l|} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{j'}|} + V(\mathbf{r}) \right\} \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r}) \quad (3.13)$$

dove abbiamo indicato con Z_l e \mathbf{R}_l la carica e la posizione dei nuclei, con \mathbf{r}_j la posizione del j-esimo elettrone. E' evidente un problema di fondo: noi supponiamo di conoscere a priori la posizione dei nuclei e degli elettroni; ma queste informazioni sono contenute nella $\psi(\mathbf{r})$, infatti come si osserva dalla 3.14 la densità di carica è dedotta dalle autofunzioni:

$$n(\mathbf{r}) = |\psi(\mathbf{r})|^2 \quad (3.14)$$

questo dimostra l'autoconsistenza del problema quantistico. Inoltre risolvere in modo diretto la 3.13 è impossibile per sistemi di interesse pratico, infatti si richiederebbero enormi risorse computazionali e tempi proibitivi.

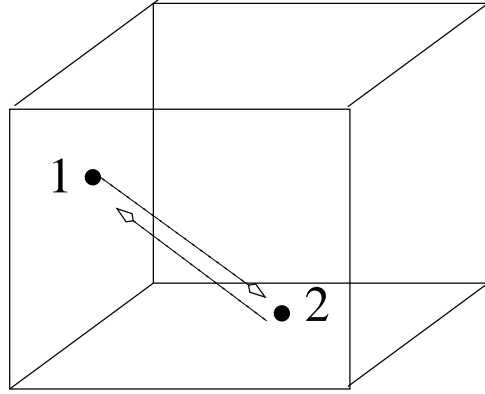


Figura 3.1: Due elettroni sono intrappolati in un volume V

3.2.2 Condizioni al contorno

La condizione al contorno per l'equazione di S. è imporre nulla la funzione d'onda nella frontiera della regione d'analisi:

$$\psi(\mathbf{r}) = 0, \forall \mathbf{r} \in \partial V$$

Questa condizione è tipica di un sistema fortemente confinato, da questo deriva che il modello 3D quantistico implementato deve essere applicato ad un sistema fortemente confinato come un QD.

3.2.3 DFT

Allo scopo di risolvere l'eq. di S., seguiremo l'approccio della *Density Functional Theory* per la quale nel 1998 **Arthur Kohn** ricevette il premio Nobel.

Il noto teorema di Hohenberg e Kohn recita che l'energia dello stato non eccitato di un sistema di particelle dipende univocamente dalla distribuzione di esse.

Inquadriamo il problema con un esempio pratico:

Intrappoliamo due particelle in un volumetto V . Le particelle si scambieranno mutuamente forze, e per tenere conto di queste aggiungiamo al potenziale di confinamento $V(\mathbf{r})$ il potenziale generato da ogni particella. Facciamo attenzione però che ogni particella non risente del potenziale generato da se stessa, per questa ragione deve essere sottratto un termine V_{ex} di auto scambio. Una volta corretto il potenziale entrambe le particelle è come si muovessero indipendentemente nel volumetto, e quindi basterà risolvere l'equazione di S. di particella per ognuna delle particelle.

Quanto appena detto esemplifica il noto *Mean Field Approach*, ossia approccio in campo medio. Identifichiamo una particella, allora tutte le iterazioni fra la particella e il resto della distribuzione di carica è tenuta in conto da un campo medio nel quale la particella si muove indipendentemente dalle altre.

Poniamo:

$$\begin{aligned} n(\mathbf{r}) &= n_{\uparrow}(\mathbf{r}) + n_{\downarrow}(\mathbf{r}) \\ \zeta(\mathbf{r}) &= \frac{n_{\uparrow}(\mathbf{r}) - n_{\downarrow}(\mathbf{r})}{n_{\uparrow}(\mathbf{r}) + n_{\downarrow}(\mathbf{r})} \end{aligned} \quad (3.15)$$

identifichiamo con $\sigma = (\uparrow, \downarrow)$. Minimizzando il funzionale dell'energia rispetto alle σ -densità, si ricava la nota equazione di Kohn-Sham:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2} \nabla \left(\frac{1}{m^*} \nabla \right) + V_{KS,\sigma}[n, \zeta] \right) \Phi_{i,\sigma}(\mathbf{r}) = \epsilon_{i,\sigma} \Phi_{i,\sigma}(\mathbf{r}) \quad (3.16)$$

dove l'effettivo potenziale è da:

$$V_{KS,\sigma}[n, \zeta] = V(\mathbf{r}) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \int_V \frac{n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} + \frac{\partial E_{xc}[n, \zeta]}{\partial n_{\sigma}(\mathbf{r})} \quad (3.17)$$

Nell'approccio locale vale:

$$E_{xc}^{LSDFA} = \int_V n(\mathbf{r}) e_{xc}(n(\mathbf{r}), \zeta(\mathbf{r})) d\mathbf{r} \quad (3.18)$$

Partendo dalle funzioni di singola particella possiamo ricavare le densità di carica tramite le equazioni:

$$n_{\sigma}(\mathbf{r}) = \sum_i \frac{||\psi_{\sigma}(\mathbf{r})||^2}{1 + \exp\left(\frac{\epsilon_{i,\sigma} - E_f}{K_b T}\right)} \quad (3.19)$$

Nella 3.19 la sommatoria è estesa su tutti gli infiniti stati. In realtà quando il termine $\epsilon_{i,\sigma} - E_f \geq 4K_b T$ possiamo arrestare la somma.

3.2.4 CSDFA

Se ci troviamo in presenza di campi magnetici, il corretto approccio è quello della *Current Spin Density Functional Approach*.

Consideriamo campi magnetici della forma $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$. Avremo quindi che il pot. vettore sarà della tipo:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{B}{2}(-y, x)$$

Il potenziale vettore è dato dall'espressione:

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r})$$

Introduciamo la densità di corrente paramagnetica:

$$\mathbf{j}_p(\mathbf{r}) = -\frac{i\hbar}{2m^*} \sum_{i,\sigma} f_{i,\sigma} [\phi_{i,\sigma}^*(\mathbf{r}) \nabla \phi_{i,\sigma}(\mathbf{r}) - \phi_{i,\sigma}(\mathbf{r}) \nabla \phi_{i,\sigma}^*(\mathbf{r})] \quad (3.20)$$

dove abbiamo indicato con:

$$f_{i,\sigma} = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{\epsilon_{i,\sigma} - \mu}{K_b T}\right)}$$

elaborando la 3.20 si giunge alla forma:

$$\mathbf{j}_p(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{m^*} \sum_{i,\sigma} f_{i,\sigma} (\phi_{i,\sigma}^{IM}(\mathbf{r}) \nabla \phi_{i,\sigma}^{RE}(\mathbf{r}) - \phi_{i,\sigma}^{RE}(\mathbf{r}) \nabla \phi_{i,\sigma}^{IM}(\mathbf{r})) \quad (3.21)$$

Introduciamo la vorticità:

$$\gamma(\mathbf{r}) = \nabla \times \frac{\mathbf{j}_p(\mathbf{r})}{n(\mathbf{r})} \Big|_z \quad (3.22)$$

Data la simmetria le componenti valgono le condizioni:

$$\gamma_x(\mathbf{r}) = \gamma_y(\mathbf{r}) = 0$$

La densità di corrente reale è data dall'espressione:

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \mathbf{j}_p(\mathbf{r}) + \frac{e}{m^*} \mathbf{A}(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}) \quad (3.23)$$

Supponiamo che il bulk sia omogeneo; se noi effettuassimo una traslazione del dispositivo sul piano ortogonale all'asse z la geometria e le variabili fisiche del problema non varierebbero, per cui neanche la corrente dovrebbe variare; ne deriva che $\mathbf{j}(\mathbf{r}) = 0$; questa condizione conduce alla relazione:

$$\gamma(\mathbf{r}) = -\frac{e}{m^*} \mathbf{B} \quad (3.24)$$

L'equazione di singola particella di Kohn-Sham si scrive:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \nabla \left(\frac{1}{m^*} \nabla \right) - i \frac{e\hbar}{2m^*} (\nabla \cdot \mathcal{A}(\mathbf{r}) + \mathcal{A}(\mathbf{r}) \cdot \nabla) + \mathcal{V}_\sigma(\mathbf{r}) \right] \Phi_{i,\sigma}(\mathbf{r}) = \epsilon_{i,\sigma} \Phi_{i,\sigma}(\mathbf{r}) \quad (3.25)$$

dove $\mathcal{A}(\mathbf{r}) = \mathbf{A}(\mathbf{r}) + \mathbf{A}_{xc}(\mathbf{r})$, e dove abbiamo *il potenziale vettore di exchange*:

$$\mathbf{A}_{xc} = \frac{1}{en(\mathbf{r})} \left\{ \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial [n(\mathbf{r}) e_{xc}(n_\sigma, \gamma)]}{\partial \gamma}, -\frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial [n(\mathbf{r}) e_{xc}(n_\sigma, \gamma)]}{\partial \gamma} \right\} \quad (3.26)$$

dove:

$$\mathcal{V}_\sigma(\mathbf{r}) = \frac{e^2}{2m^*} \|\mathbf{A}(\mathbf{r})\|^2 + V_\sigma(\mathbf{r}) + V_H(\mathbf{r}) + V_{xc\sigma}(\mathbf{r}) \quad (3.27)$$

Le varie componenti di $\mathcal{V}_\sigma(\mathbf{r})$ sono:

$$\begin{aligned} V_{\uparrow, \downarrow} &= V(\mathbf{r}) + \pm \frac{1}{2} g^* \mu_B B \\ V_H &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \int_V \frac{n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' \\ V_{xc\sigma} &= \frac{\partial [n(\mathbf{r}) e_{xc}(n_\sigma, \gamma)]}{\partial n_\sigma} - \frac{e}{n(\mathbf{r})} \mathbf{j}_p \cdot \mathbf{A}_{xc}(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (3.28)$$

3.2.5 Termine di Exchange

Il termine di exchange sono particolarmente importante nell'approccio con la DFT. Introduciamo il *filling factor* dei livelli di **Landauer**:

$$\nu = \frac{2\pi\hbar n_{2D}(\mathbf{r})}{eB} \quad (3.29)$$

Facciamo attenzione che il filling factor è adimensionale.

Poniamoci nelle condizioni di $\nu \leq 1$, ossia per campi magnetici alti e bassi densità, allora vale[16]:

$$e_{XC}^{LWM}(r_s, \nu) = -0.782 \cdot 133 \frac{2\sqrt{2}}{r_s} (1 - 0.211\nu^{0.74} + 0.012\nu^{1.7}) [Ry^*] \quad (3.30)$$

Indichiamo con Ry^* il Rydberg equivalente:

$$Ry^* = \frac{m^* e^4}{2\hbar^2 (4\pi\epsilon\epsilon_0)^2}$$

con m^* massa efficace dell'elettrone per la densità di stati. dove r_s è il raggio che contiene un elettrone che spesso in letteratura è chiamato fattore di densità:

$$r_s(\mathbf{r}) = \frac{1}{n_{2D}(\mathbf{r})} [a_0^*] \quad (3.31)$$

Dove abbiamo indicato:

$$a_0^* = \frac{\hbar^2 (4\pi\epsilon\epsilon_0)}{m^* e^2}$$

Nel caso di $\nu \geq 1$ vale l'interpolazione con metodi Monte Carlo di **Tanatar** e **Ceperley**[15]:

$$e_c^{TC}(r_s, \xi) = a_0 \frac{1 + a_1 x}{1 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3} [Ry^*] \quad (3.32)$$

$$x = \sqrt{r_s} [(a_0^*)^{\frac{1}{2}}]$$

$$f(\xi) = \left[(1 + \xi)^{\frac{3}{2}} + (1 - \xi)^{\frac{3}{2}} \right] \quad (3.33)$$

$$e_{XC}^{TC} = \frac{-4\sqrt{2}}{3\pi r_s} \left[(1 + \xi)^{\frac{1}{2}} + (1 - \xi)^{\frac{1}{2}} \right] + e_c^{TC}(r_s, \xi = 1) + [e_c^{TC}(r_s, \xi = 0) - e_c^{TC}(r_s, \xi = 1)] f(\xi) [Ry^*] \quad (3.34)$$

Dove con $e_c^{TC}(\xi = 0, R_s)$ e $e_c^{TC}(\xi = 1, r_s)$ abbiamo indicato le funzioni di correlazioni di Tanatar e Ceperley calcolate rispettivamente nel caso di completa polarizzazione e nulla polarizzazione del dot. Riportiamo di seguito i valori dei coefficienti a_0, a_1, a_2, a_3 reperibili nella tab IV di [15]:

	Normal	Polarized
a_0	-0.3568	-0.0515
a_1	1.1300	340.5813
a_2	0.9052	75.2293
a_3	0.4165	37.0170

Tabella 3.1: Coefficienti dell'interpolazione di e_c^{TC} con metodi Monte Carlo reperibili in [15].

Note le 3.30 e 3.34, proponiamo un funzione di exchange che sia valida sia per $\nu \geq 1$ e $\nu \leq 1$ [13]:

$$e_{XC}(n_{2D}, \xi, \nu) = \frac{e_{XC}^{LWM}(n_{2D}, \nu) + \nu^4 e_{XC}^{TC}(n_{2D}, \xi)}{1 + \nu^4}. \quad (3.35)$$

Un'altro approccio è quello proposto da Koskinen *et al* [11], che propone la formula di exchange:

$$e_{XC}^K = e_{XC}^\infty(n_{2D})e^{-f(\nu)} + e_{XC}^{TC}(n_{2D}, \xi) (1 - e^{-f(\nu)}) \quad (3.36)$$

dove:

$$f(\nu) = 1.5\nu + 7\nu^4$$

$$e_{XC}^\infty(n_{2D}) = \frac{-0.782\sqrt{2\pi n_{2D}e}}{4\pi\epsilon\epsilon_0} [eV]^{-1} \quad (3.37)$$

Le formule di XC esposte sono relative ad un gas 2-dimensionale di elettroni(2DEG). Il nostro risolutore di Schroedinger produce $\Phi_{i,\sigma}(\mathbf{r})$ sullo spazio tridimensionale. Risolviamo questa incongruenza con la seguente relazione:

$$n_{2D}(x, y) = \int_{z_{MIN}}^{z_{MAX}} n_{3D}(x, y, z) dz \quad (3.38)$$

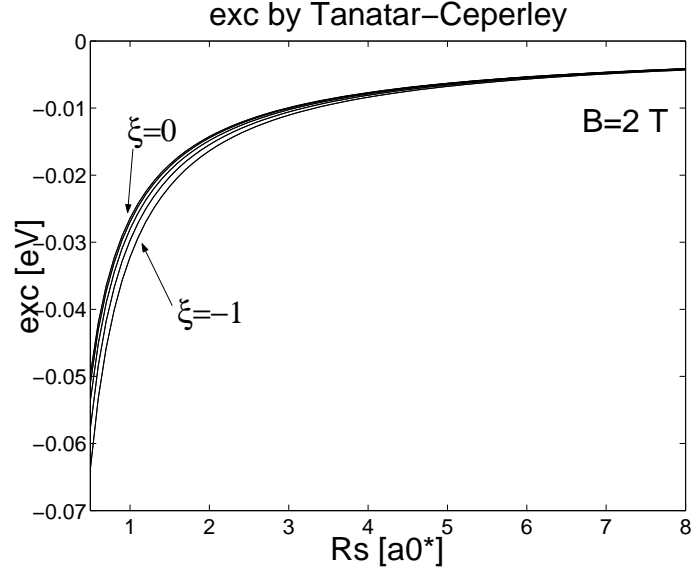


Figura 3.2: Funzione di XC di *Tanatar and Ceperley* [15] per il silicio rispetto al fattore di densità r_s e alla polarizzazione ξ con passo 0.1 per un campo magnetico $B = 2$ T

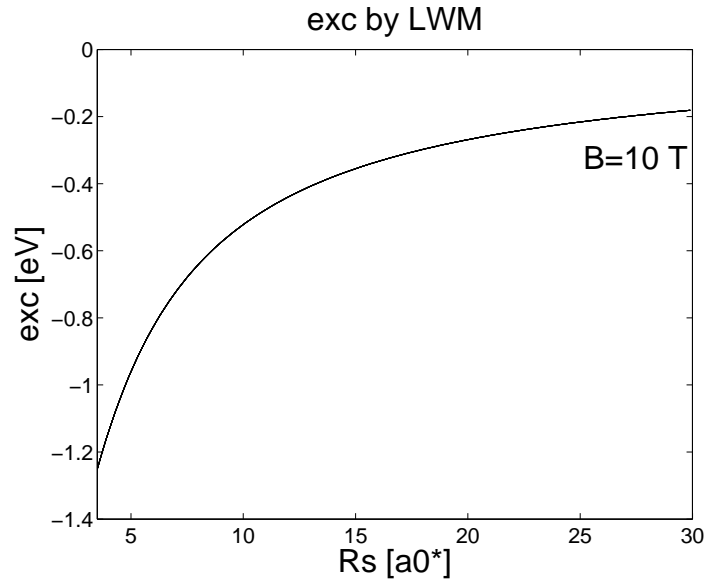


Figura 3.3: Funzione di e_{xc}^{LWM} di *Levesque et al.* per il silicio rispetto al fattore di densità r_s e alla polarizzazione ξ con passo 0.1 e con campo magnetico applicato $B = 10$ T.

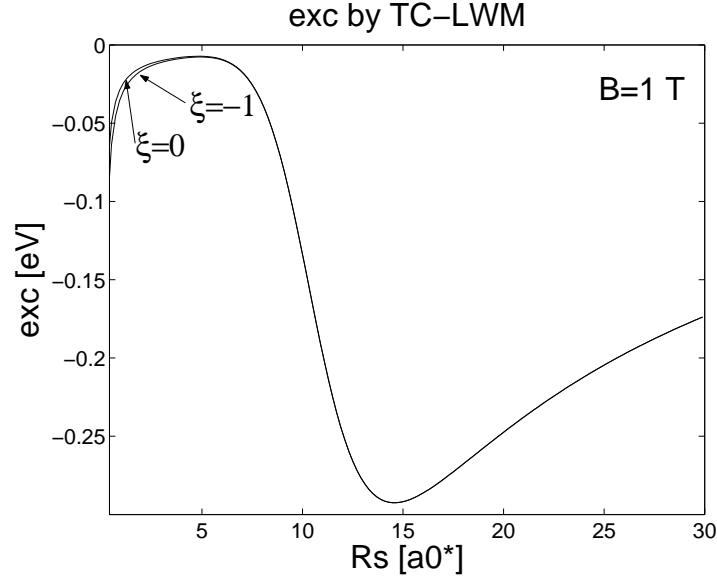


Figura 3.4: Grafico della 3.35 valida per il silicio, sia per $\nu \leq 1$ che per $\nu \geq 1$, ottenuta a partire dalle formulazioni di TC e LWM, rispetto al fattore di densità r_s e per due valori di $\xi = -1, 0$ e con campo $B = 1$ T

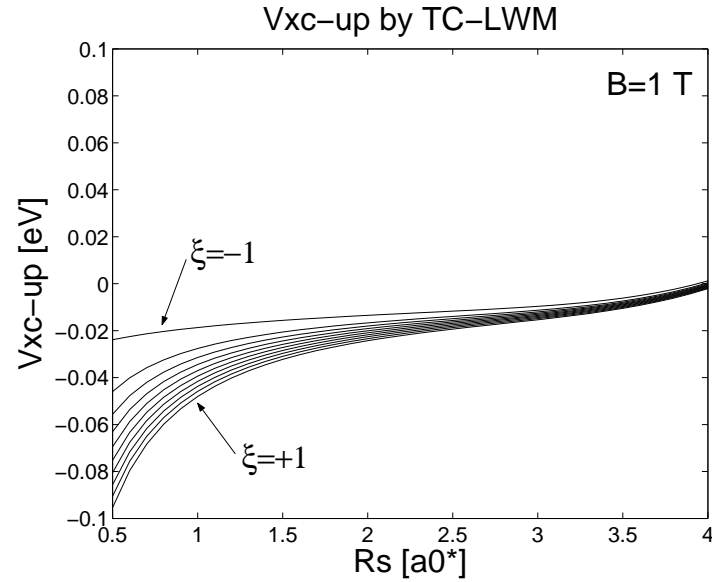


Figura 3.5: Potenziale $V_{XC,up}$ ottenuto dalle formulazioni di TC e LWM valido per il silicio, al variare del parametro di densità r_s e della polarizzazione $\xi = [-1, 1]$ con campo fissato $B = 1$ T.

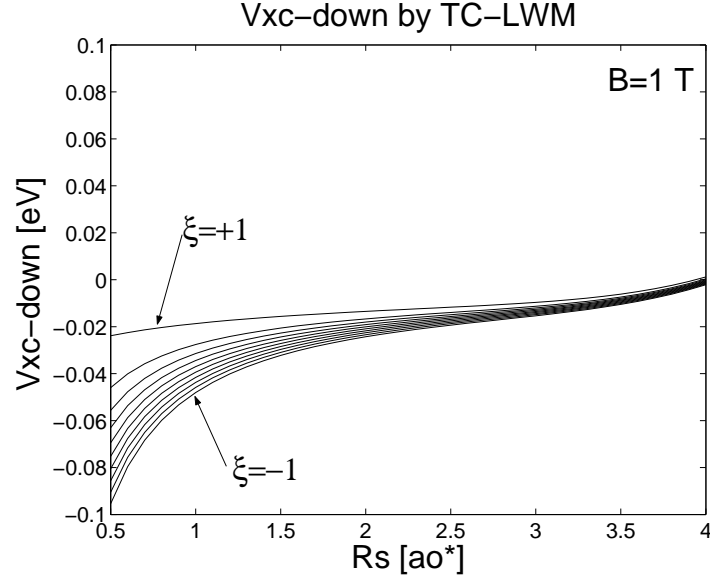


Figura 3.6: Potenziale $V_{XC,down}^{TC,LWM}$ ottenuto dalle formulazioni di TC e LWM valido per il silicio, al variare del parametro di densità r_s e della polarizzazione $\xi = [-1, 1]$ con campo fissato $B = 1$ T.

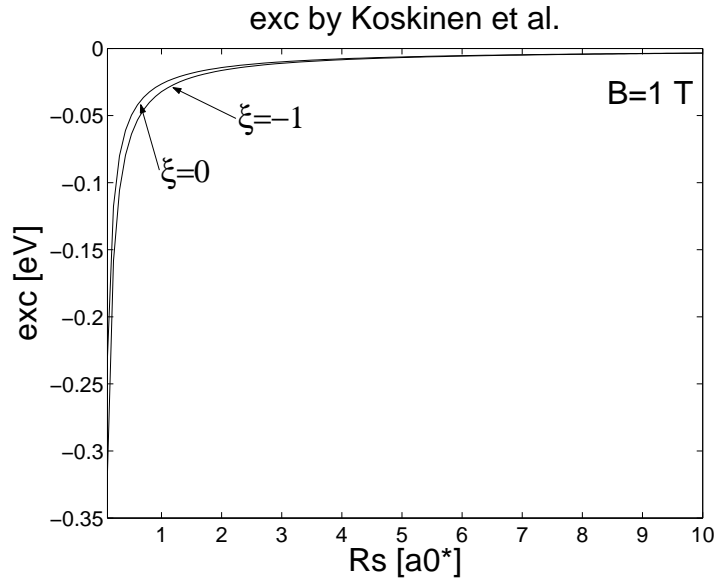


Figura 3.7: Funzione e_{XC}^K per il silicio, dalla formulazione di *Koskinen et al.* [11], al variare del parametro di densità r_s e per due valori di polarizzazione $\xi = -1, 0$, con campo fissato $B = 1$ T.

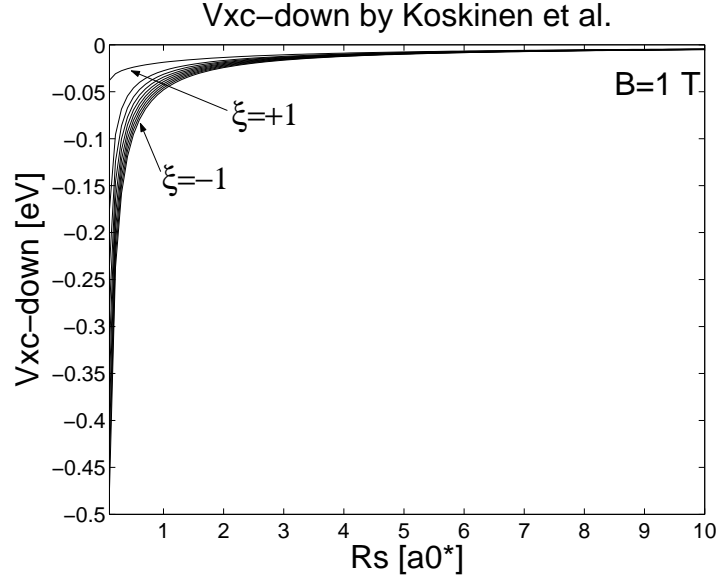


Figura 3.8: Potenziale $V_{XC,down}^K$ per il silicio dalla formulazione di *Koskinen*, al variare del fattore di densità r_s e per valori di polarizzazione $\xi = [-1, 1]$ con passo 0.1, e con campo fissato $B = 1\text{T}$.

3.3 Regola di Slater

Analizziamo più attentamente la 3.19:

$$n_\sigma(\mathbf{r}) = \sum_i \frac{||\psi_\sigma(\mathbf{r})||^2}{1 + \exp\left(\frac{\epsilon_{i,\sigma} - E_f}{K_b T}\right)}$$

La densità di carica è funzione del livello di fermi, ma allo stesso tempo il livello di Fermi è funzione della distribuzione di carica. Questo è un problema di autoconsistenza che possiamo risolvere tramite la regola di Slater per il calcolo del potenziale elettrochimico: *Il potenziale elettrochimico del Dot è calcolato riempiendo l'ultimo livello con mezzo elettrone.*

Supponiamo di voler calcolare il potenziale elettrochimico di un dot con N -elettroni. Il fattore di occupazione è pari ad uno per tutti gli elettroni interi, e 0.5 per l'elettrone a energia più alta.

Facciamo un esempio: supponiamo di avere 7 elettroni. Secondo la regola

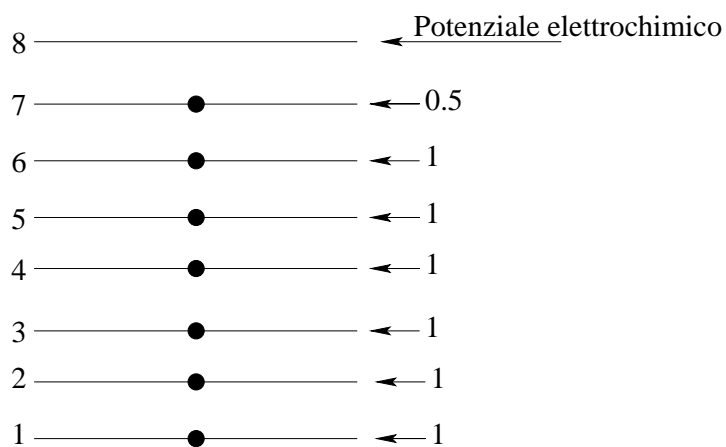


Figura 3.9: Applicando la regola di Slater ad un dot con 7 elettroni, notiamo che il fattore di occupazione vale 1 per i primi 6 livelli mentre 0.5 per il settimo livello. Il EP è quello dell'ottavo livello.

devo considerare 6 elettroni interi ed $\frac{1}{2}$ elettrone. Il fattore di occupazione vale 1 per tutti gli elettroni interi e $\frac{1}{2}$ per il mezzo elettrone.

Capitolo 4

Il Simulatore

Il simulatore è lo strumento di calcolo utilizzato nel nostro progetto. Esso si basa su un complesso di *routine* sviluppate da più persone. Discuteremo in questo capitolo dei suoi aspetti più importanti tra cui la metodologia di risoluzione delle equazioni, l'algoritmo autoconsistente, la strutturazione dei dati etc.

4.1 Il Box Integration

Definiamo con *Box Integration* (BI) il dominio 3D discreto sul quale vengono risolte le equazioni (il dominio non può che essere discreto; infatti le equazioni vengono risolte da un calcolatore).

Ad ogni punto del BI sono associate le coordinate (x, y, z) .

Il programma atto al calcolo del BI è **gr3d**. E' scritto in linguaggio FORTRAN, e a partire da un file d'ingresso detto `gggriglia.dat` restituisce quattro file chiamati **grigliax.out**, **grigliay.out**, **grigliaz.out**, **punti.out** e **dimension.in**. Nei file `grigliax.out`, `grigliay.out`, `grigliaz.out` sono registrate le coordinate dei rispettivi assi. I file `dimension.in` e `punti.out` registrano alcune informazioni della griglia quali il numero di punti totale, il numero di punti lungo x, y e z etc. Il file `punti.out` è necessario alle routine che gestiscono la visualizzazione dei risultati.

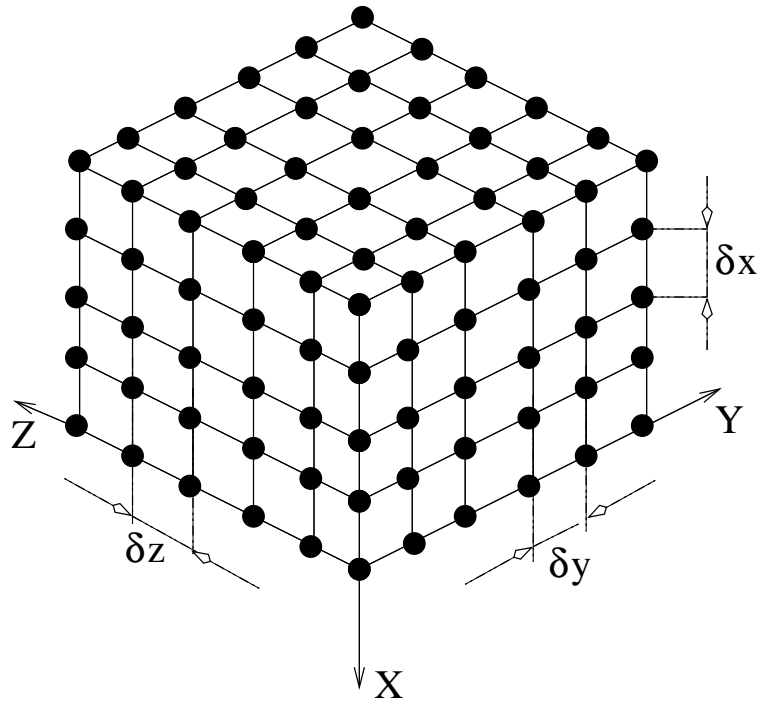


Figura 4.1: Box Integration 3D: sono visibili l'orientazione degli assi, e i passi di integrazione δ_x , δ_y e δ_z .

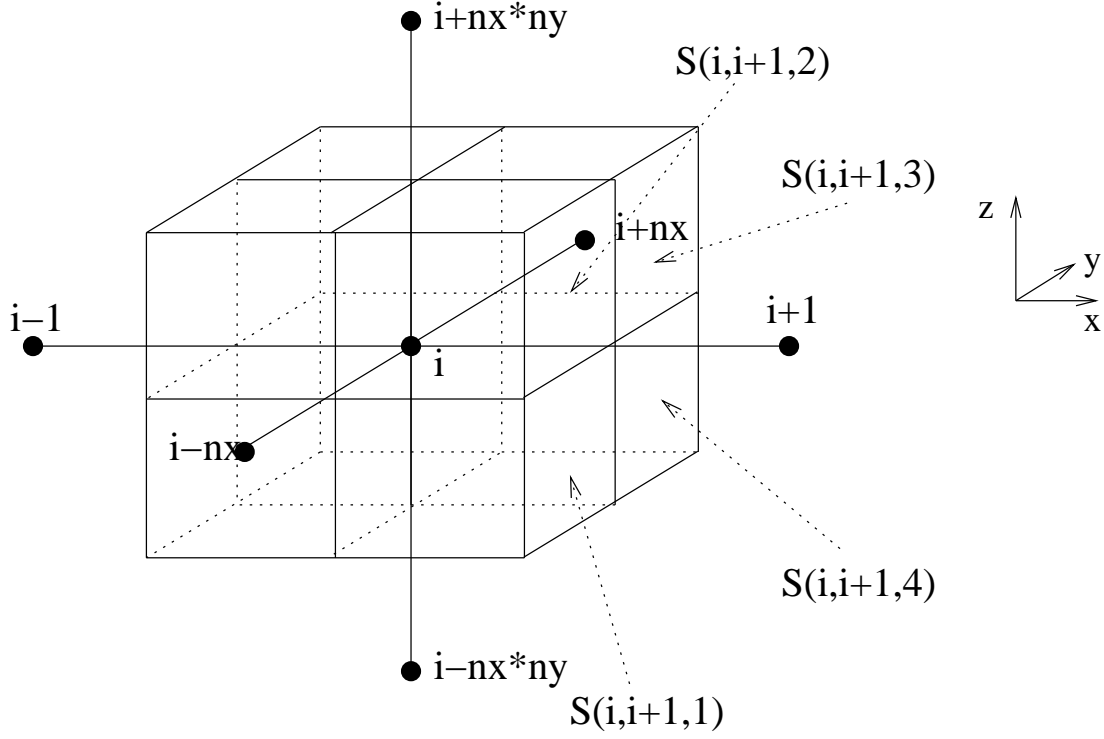


Figura 4.2: Volume elementare di integrazione. Suponiamo di numerare ordinatamente i punti della griglia e le sottosuperfici del volume elementare con i numeri da 1 a 4. Indichiamo con n_x il numero di punto lungo la direzione x , e con n_y il numero di punti lungo la direzione y .

4.2 Discretizzazione delle equazioni

Poniamoci il problema sul come implementare la 3.12 e la 3.11.

Definiano una funzione così fatta:

$$j(i, k) = num$$

Approssimiamo le derivate nel modo seguente:

$$\frac{d}{dx} f_i \simeq \frac{f_{i+1} - f_i}{x_{i+1} - x_i}$$

k	num
1	+1
2	-1
3	+ n_x
4	- n_x
5	+ $n_x \cdot n_y$
6	- $n_x \cdot n_y$

Definiamo con $dist(i, j(i, k))$ la distanza tra il punto i-esimo e j-esimo:

$$\begin{aligned}
dist(i, 1) &= x_{i+1} - x_i \\
dist(i, 2) &= x_{i-1} - x_i \\
dist(i, 3) &= y_{i+n_x} - y_i \\
dist(i, 4) &= y_{i-n_x} - y_i \\
dist(i, 5) &= z_{i+n_x \cdot n_y} - z_i \\
dist(i, 6) &= z_{i-n_x \cdot n_y} - z_i
\end{aligned} \tag{4.1}$$

della graiglia, $S(i, j(i, k), l)$ con $l = 1, \dots, 4$ la sottosuperficie del volumetto elementare.

$$\int_{\delta V_i} \epsilon(\mathbf{r}) \nabla \phi(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{S}_i = \sum_{k=1}^6 \frac{\alpha(i, j(i, k))}{dist(i, j(i, k))} (\phi_{j(i, k)} - \phi_i). \tag{4.2}$$

con α :

$$\alpha(i, j(i, k)) = \sum_{l=1}^4 S(i, j(i, k), l) \epsilon(i, j(i, k), l) \tag{4.3}$$

quindi, sfruttando il teorema di Gauss sulla divergenza la 3.11 può essere approssimata come segue:

$$\sum_{k=1}^6 \frac{\alpha(i, j(i, k))}{dist(i, j(i, k))} (\phi_{j(i, k)} - \phi_i) = -\rho_i V_i. \tag{4.4}$$

Allo stesso modo procediamo con la 3.12:

$$\int_{\partial V_i} \frac{1}{m} \nabla \Psi \cdot d\mathbf{S}_i = \sum_{k=1}^6 \frac{\alpha'(i, j(i, k))}{\text{dist}(i, j(i, k))} (\Psi_{j(i, k)} - \Psi_i). \quad (4.5)$$

dove abbiamo indicato con:

$$\alpha'(i, j(i, k)) = \sum_{l=1}^4 \frac{S(i, j(i, k), l)}{m(i, j(i, k))} \quad (4.6)$$

4.3 QDCAD

Il vero programma di Simulazione è QDCAD (*Quantum Dot CAD*). Nella 4.3 il flusso di esecuzione delle routine più significative.

La routine **struttura()** a partire dai file *griglia* e il file *ssstref.dat* costruisce la struttura fisica e geometrica del dispositivo. Ad esempio, ad un punto del BI devono essere associate proprietà quali il tipo di materiale, drogaggio, potenziale etc. Le informazioni sulle caratteristiche fisiche di un materiale sono contenute in un file chiamato **input.material** del quale riportiamo un frammento relativo alla definizione del silicio.

```
5 NUMERODIMATERIALIDEFINITI
1 Si(100)[silicio]
0.015 mobilita'elettroni
0.007 mobilita'lacune
0.4e-12 taun
0.4e-12 taup
0.5 livellotrappole
0.045 LivelloAccettori(Ea-Ev)[eV]
0.045 LivelloDonatori(Ec-Ed)[eV]
4.05 Affinita'Elettronica[eV]
11.8 CostanteDielettrica relativa
0.98 MassaLongitudinaleeletttrone
0.19 MassaTrasversaleeletttrone
0.549199 Massalacune
1.17 Gap0K[eV]
4.73e-4 Parametroalfa(gap)
636 Parametrobeta(gap)
0 NONSIGNIFICATIVO
0 NONSIGNIFICATIVO
0 NONSIGNIFICATIVO
0 NONSIGNIFICATIVO
0 NONSIGNIFICATIVO
```

Inoltre, *struttura* deve costruire le *region* dove effettuare l'analisi quantitativa. Nella appendice B abbiamo riportato il codice da noi scritto per

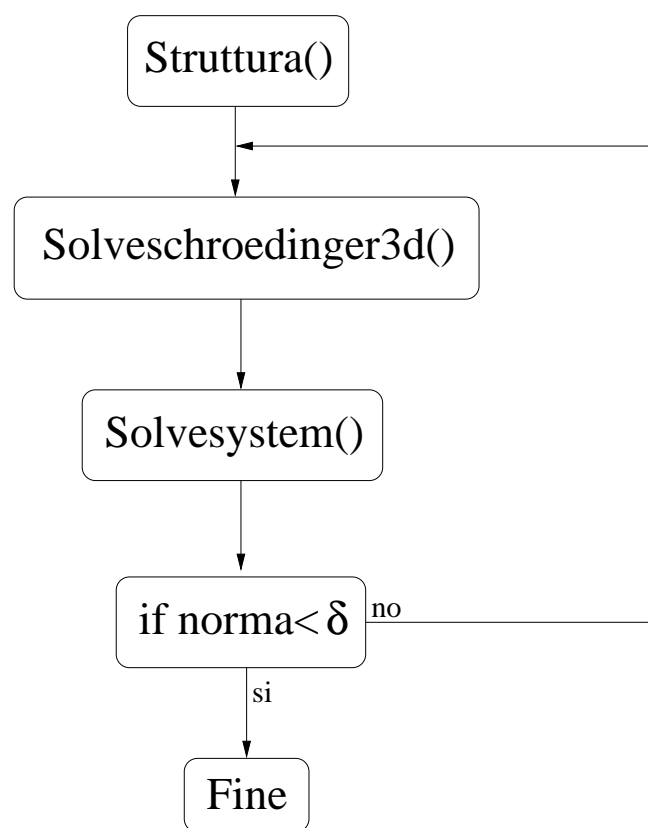


Figura 4.3: Flusso di programma di QDCAD.

realizzare questa funzione.

Al fine di migliorare la convergenza della simulazione è conveniente partire da una soluzione iniziale semiclassica. Quindi, il primo passo è il calcolo della soluzione semiclassica, e le simulazioni quantistiche successive potranno sfruttare la soluzione semiclassica come punto iniziale. Facciamo attenzione che quando vogliamo che il simulatore parta da una soluzione iniziale definita, è necessario che nelle directory contenente il programma sia contenuto il file *Phi.out* che contiene i valori del potenziale del dispositivo.

Creata la struttura, il passo successivo è quello dell'analisi quantistica fatta da **Solveschroedinger3d()** (riportiamo i codici sorgente nella Appendice B).

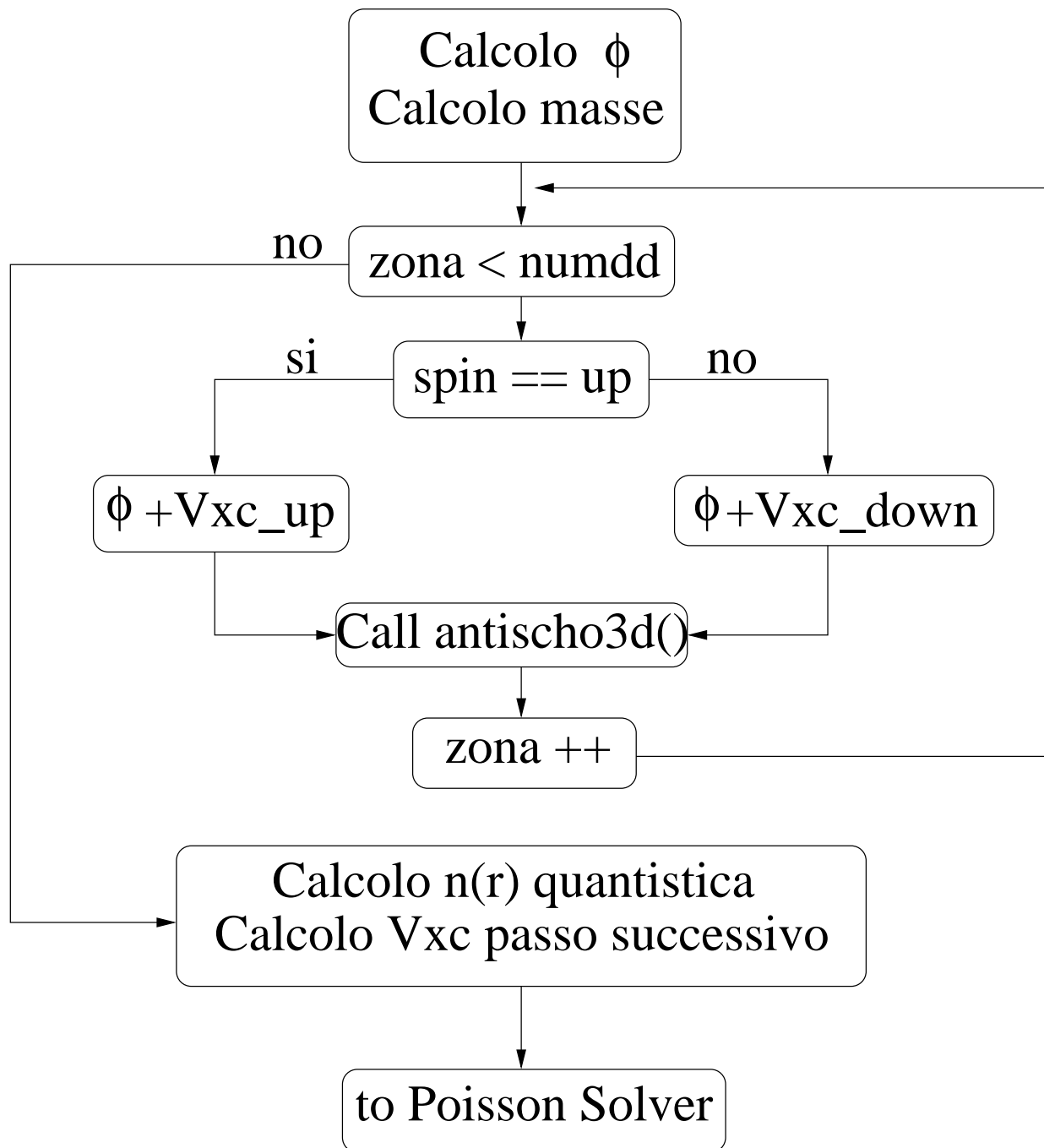


Figura 4.4: Flusso di programma del solutore di Schrödinger.

Il risultato di *solveschroedinger3d()* è la carica quantistica calcolata in base alla 3.19, e passata come ingresso a *solvesystem()*. Quest'ultima routine altro non è che il risolutore di **Poisson** (rimandiamo al [6] per un'analisi accurata e dettagliata della routine). Il risolutore di Poisson sfrutta il metodo iterativo di **Newton-Raphson** per determinare il potenziale nel dispositivo. Rimandiamo al 4.3.1 per la descrizione del metodo.

Il potenziale calcolato al passo $k+1$ -esimo viene confrontato con quello al passo precedente. Se risulta:

$$||\phi_{k+1} - \phi_k|| \leq \delta \quad (4.7)$$

allora il ciclo autoconsistente si arresta e la simulazione termina stampando i file di uscita.

In figura 4.4 abbiamo riportato il flusso di programma che gestisce i calcoli quantistici 3d. Il solutore deve essere lanciato tante volte quante sono le regione 3d quantistiche da analizzare. Salvo impostazioni contrarie il numero massimo di tali regioni è 10.

All'interno del solutore il primo passo è quello di calcolare il potenziale privo di exchange e i vettori delle masse. Il potenziale è calcolato mediante la funzione **BC()** che implementa la relazione:

$$BC = \phi_{m1} + Ef_1 - \chi_i - \phi_i \quad (4.8)$$

dove ϕ_{m1} e Ef_1 sono rispettivamente potenziale e livello di fermi del gate di riferimento, mentre χ_i e ϕ_i sono l'affinità elettronica e il potenziale nel punto i -esimo.

Il silicio è un materiale anisotropo che presenta tre minimi in banda di conduzione. Questo comporta una difficoltà ulteriore nelle simulazioni di dispositivi di silicio. Se sviluppiamo al secondo ordine la relazione di dispersione dei minimi:

Minimo	x	y	z
1 ^o	m_{e1}	m_{e2}	m_{e3}
2 ^o	m_{e3}	m_{e1}	m_{e2}
3 ^o	m_{e2}	m_{e3}	m_{e1}

Tabella 4.1:

$$m^* = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(k)}{\partial k^2} \quad (4.9)$$

Se la relazione di dispersione $E = f(k)$ varia da minimo a minimo, allora anche le masse efficaci varieranno a seconda del minimo. In partilare, per il silicio due masse longitudinali m_l^* e una massa trasversale m_t^* .

Il nostro simulatore tiene conto dell'anisotropia delle masse grazie al flag **isani**, associato ad ogni regione di analisi. In particolare se *isani* == 1 allora la regione di analisi non contiene nessun punto di anisotropia. Per il silicio abbiamo un ulteriore flag detto **silicioschro**. Se esiste almeno un punto di silicio interno alla regione, allora *silicioschro* = 1.

La 3.12 è risolta 2 volte nel caso di materiale isotropico, mentre è risolta sei volte nel caso del silicio. Infatti, considerando la degenerazione di spin, il numero di volte che la 3.12 deve essere risolta raddoppia. Prendiamo l'esempio del silicio: vengono costruiti tre vettori m_{e1} , m_{e2} , m_{e3} di N_{ps} (indichiamo con N_{ps} il numero di punti della regione quantistica), double contenenti le masse nelle tre direzioni. Le masse vengono passate al solutore nell'ordine definito nella 4.1.

I sei insiemi di autovalori vengono poi ordinati per ricavare la scala di energie della regione. Questa operazione è eseguita dalla funzione **eigensort()**. Nota la scala di energie è possibile calcolare la densità di carica in base alla 3.19 grazie alla routine **ncarspin3d()**. Si calcolano poi i potenziali correttivi di exchange da applicare al passo successivo. Questo è ottenuto tramite le funzioni **XCup()** e **XCdown()** che calcolano rispettivamente il potenziale di exchange spinup e spindown.

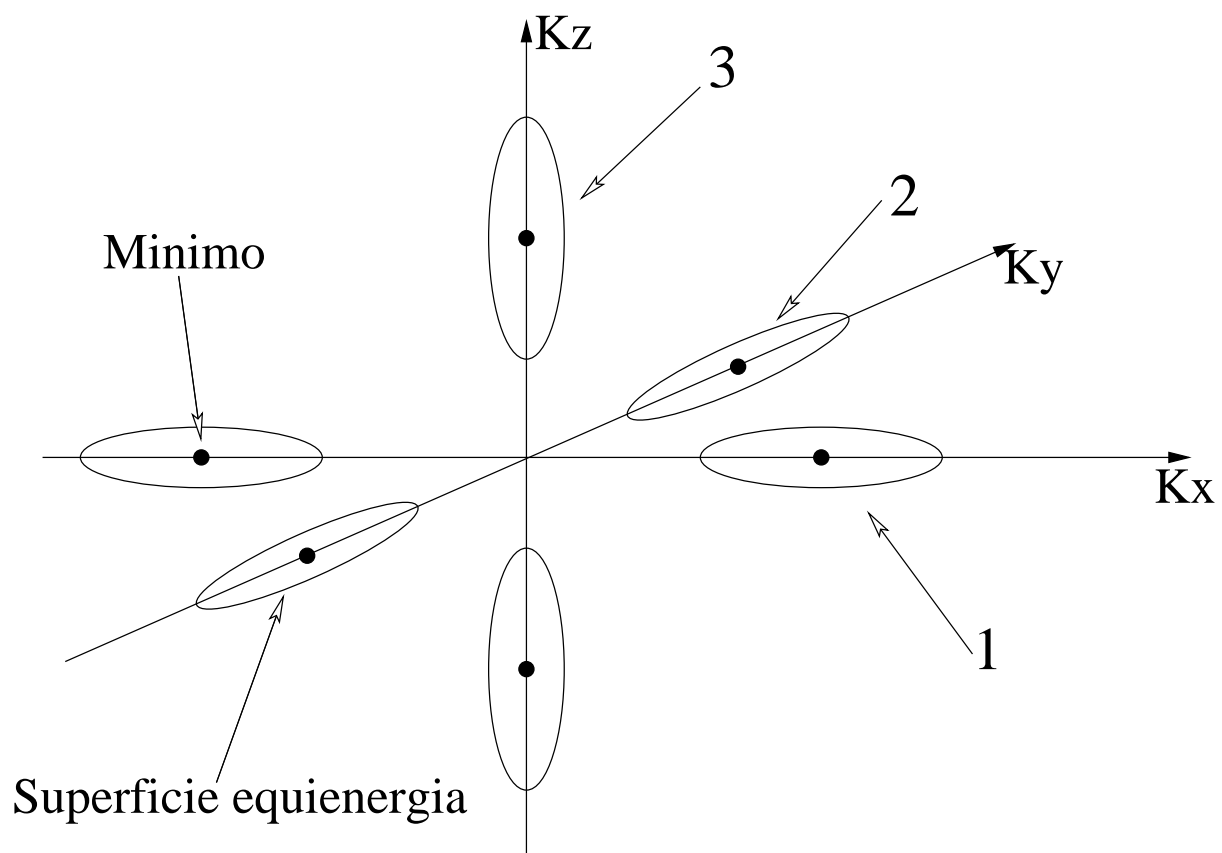


Figura 4.5: Superfici equienergia del Si nello spazio dei K.

Il cuore del solutore è **antischo3d()**, ossia una routine scritta in FORTRAN che a partire dalla banda di conduzione, dai vettori m_{ei} , dal valore dello spin, del fattore giromagnetico e dal valore del campo magnetico, calcola le autofunzioni e gli autovalori nella regione quantistica. La routine risolve la 3.12 nello spazio dei momenti, ed antitrasforma le autofunzioni nello spazio ordinario. Questa soluzione è particolarmente brillante sia per quanto riguarda la precisione dei risultati ottenuti che per il tempo di calcolo richiesto. Per maggiori dettagli rimandiamo alla lettura di [12].

4.3.1 Metodo ad un punto Newton-Raphson

Una volta discretizzata la 3.11 si perviene ad un sistema di N_p equazioni (indichiamo con N_p il numero di punti della griglia) della forma:

$$f_i(\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_{N_p}) = 0 \quad (4.10)$$

ed il sistema:

$$\begin{cases} f_1(\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_{N_p}) = 0 \\ f_2(\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_{N_p}) = 0 \\ \vdots \\ f_{N_p}(\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_{N_p}) = 0 \end{cases} \quad (4.11)$$

dove l'incognita del problema è il vettore ϕ che ha come componenti il potenziale calcolato nei punti N_p della griglia. Supponiamo di essere nelle condizioni di poter calcolare lo **Jacobiano** della $\mathbf{f}(\phi)$, ossia supponiamo che $\mathbf{f}(\phi)$ sia continua e derivabile:

$$\mathbf{J}(\phi) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial \phi_1} & \dots & \frac{\partial f_{N_p}}{\partial \phi_1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_1}{\partial \phi_{N_p}} & \dots & \frac{\partial f_{N_p}}{\partial \phi_{N_p}} \end{pmatrix} \quad (4.12)$$

Supponiamo di conoscere una stima $\tilde{\phi}$ della corretta soluzione $\hat{\phi}$. Allora possiamo scrivere:

$$\hat{\phi} = \tilde{\phi}_k + d\tilde{\phi}_k \quad (4.13)$$

dove il pedice k conta il passo.

Ma se $\hat{\phi}$ è la vera soluzione, allora $f(\hat{\phi}) = 0$, e quindi sfruttando una approssimazione al primo ordine:

$$\mathbf{f}(\tilde{\phi}_k + d\tilde{\phi}_k) = \mathbf{f}(\tilde{\phi}_k) + \mathbf{J}(\tilde{\phi}_k)d\tilde{\phi}_k = 0 \quad (4.14)$$

da cui ricaviamo il sistema da risolvere:

$$\mathbf{J}(\tilde{\phi}_k)d\tilde{\phi}_k = -\mathbf{f}(\tilde{\phi}_k) \quad (4.15)$$

Capitolo 5

Simulazione di quantum dot in Silicio in campo magnetico

Iniziamo ora il capitolo dedicato alla simulazione di quantum dot in silicio per applicazioni spintroniche. Conoscere il comportamento del singolo quantum dot consente di fare delle previsioni sul funzionamento di una vasta gamma di dispositivi nano-spintronici.

5.1 Geometria e drogaggi del dispositivo.

Nella 5.1 mostriamo il layout del dispositivo. I file *ssstref.dat* e *gggriglia.dat* sono riportati nell'appendice A.

Per i drogaggi e per le varie geometrie ci siamo riferiti al [6].

Notiamo che lo spessore 10 nm dell'ossido di gate è piuttosto alto. Questa scelta è obbligata in quanto la presenza del gate vicino al dot potrebbe influire sulla distribuzione di carica rompendo la proprietà di simmetria 2D.

Il dot è stato ottenuto drogando il silicio con concentrazione di donatori 10^{20} cm^{-3} . Una concentrazione così elevata è necessaria affinché il silicio si comporti come isola metallica. Inoltre, la concentrazione di elettroni liberi

5. Simulazione di quantum dot in Silicio in campo magnetico

Geometria e drogaggi del dispositivo.

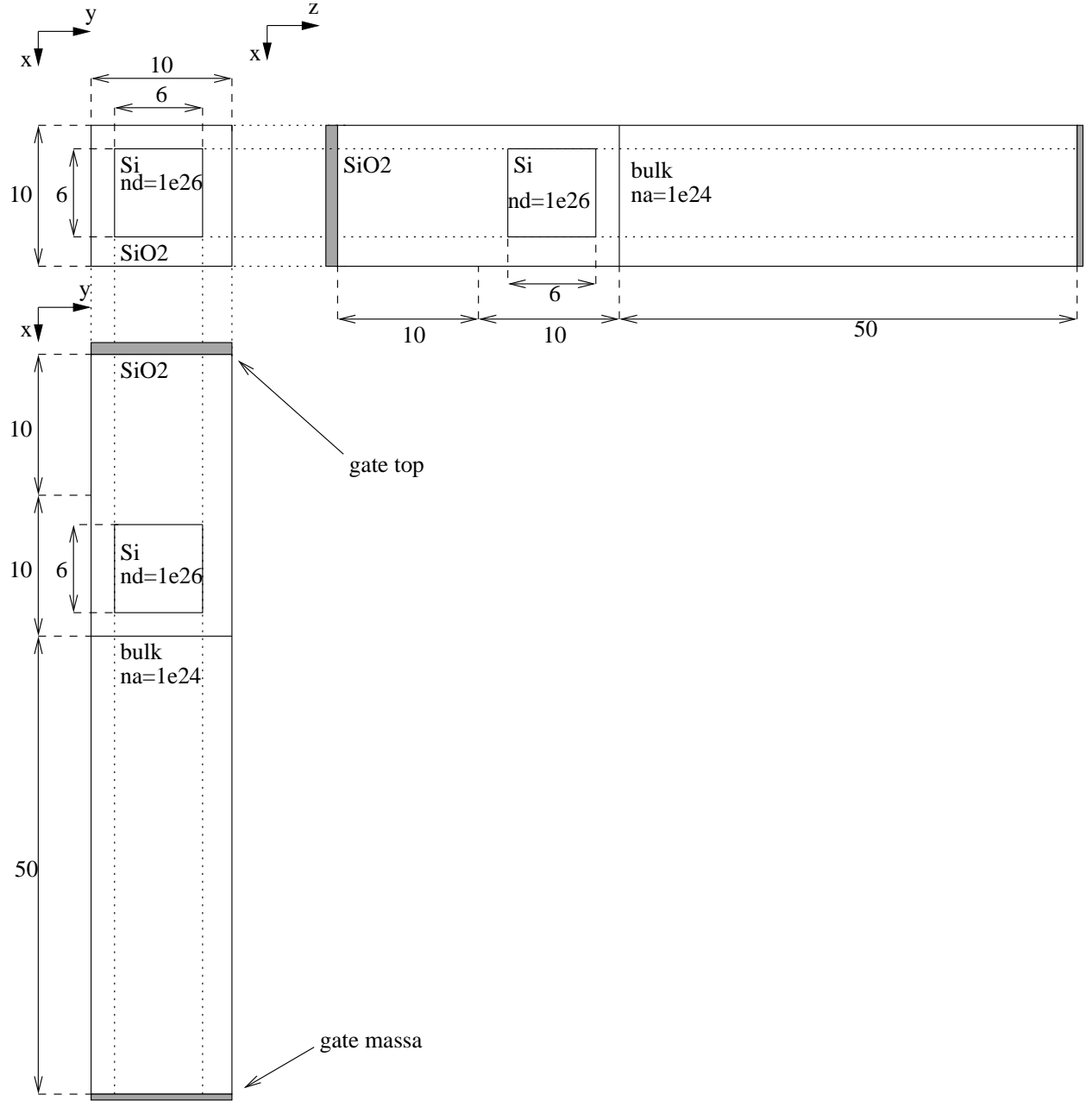


Figura 5.1: Layout dello spin quantum dot. Le dimensioni sono tutte espresse in nm. Sono visibili tutte le viste x-y, x-z, y-z. I drogaggi sono espressi in m^{-3} .

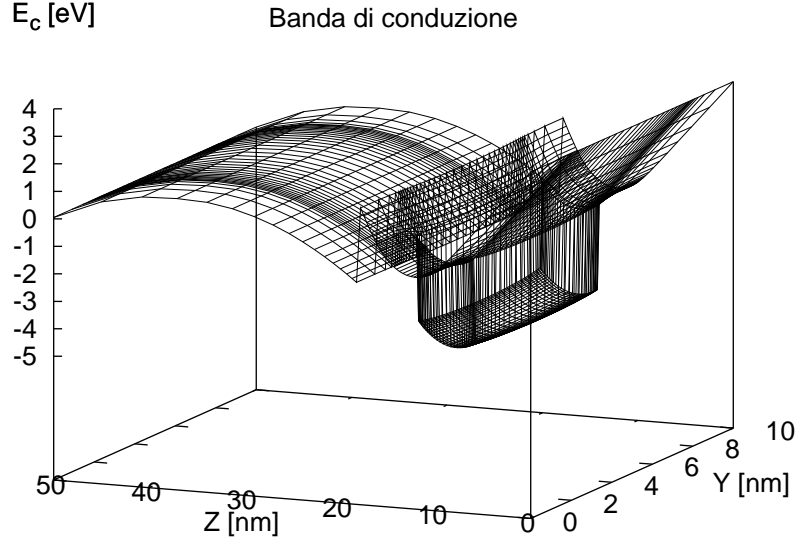


Figura 5.2: Banda di conduzione dello Spin Quantum Dot, calcolata applicando un $V_g = 0$ e con campo $B_z = 0$ lungo la sezione a $X = 5nm$.

nel dot è presente solo nella simulazione semiclassica, mentre nelle simulazioni quantistiche la carica è dedotta dalla 3.19. La regione di Bulk presenta un drogaggio tipico di atomi accettori pari a $10^{18}cm^{-3}$.

5.2 Risultati delle simulazioni

Le zone in cui la BC varia linearmente sono costituite da ossido (infatti sono prive di carica). La buca rettangolare è dovuta al confinamento del QD, che ha una altezza pari a $\simeq 3,2$ [eV] come si può osservare dalla 5.4. Nella 5.3 mostriamo la banda di conduzione del dispositivo nella sezione a $z=13$ nm.

Nella 5.5 abbiamo riportato i potenziali confinamento del Dot, attraverso

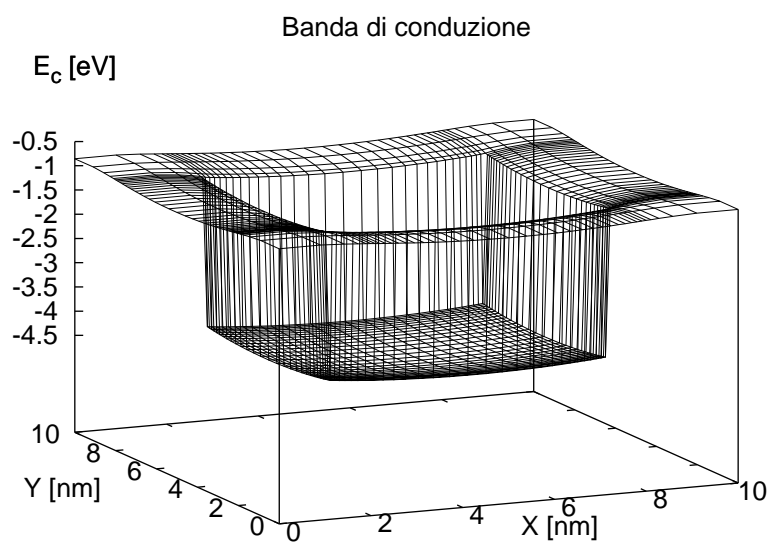


Figura 5.3: Banda di conduzione del QD lungo la sezione a $z=13$ nm. E' ben visibile il confinamento all'interno del QD.

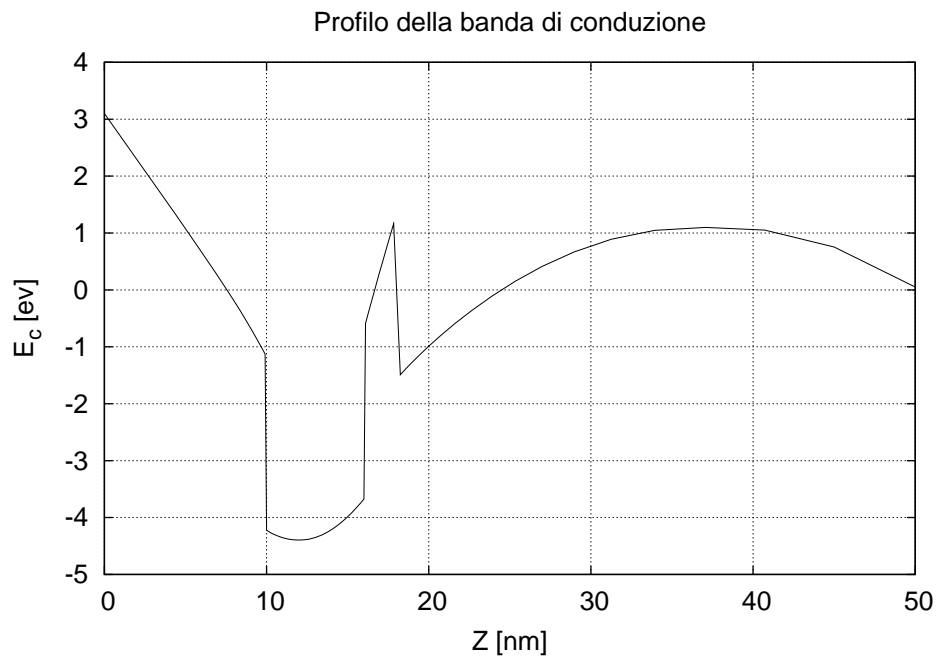


Figura 5.4: Profilo della Banda di Conduzione del SQD lungo la retta passante per $x= 5$ nm e $y= 5$ nm. Le zone rettilinee appartengono al SiO_2 , mentre le bande piegate appartengono alle regioni di Silicio. Il confinamento del QD è $\simeq 3,2$ [ev].

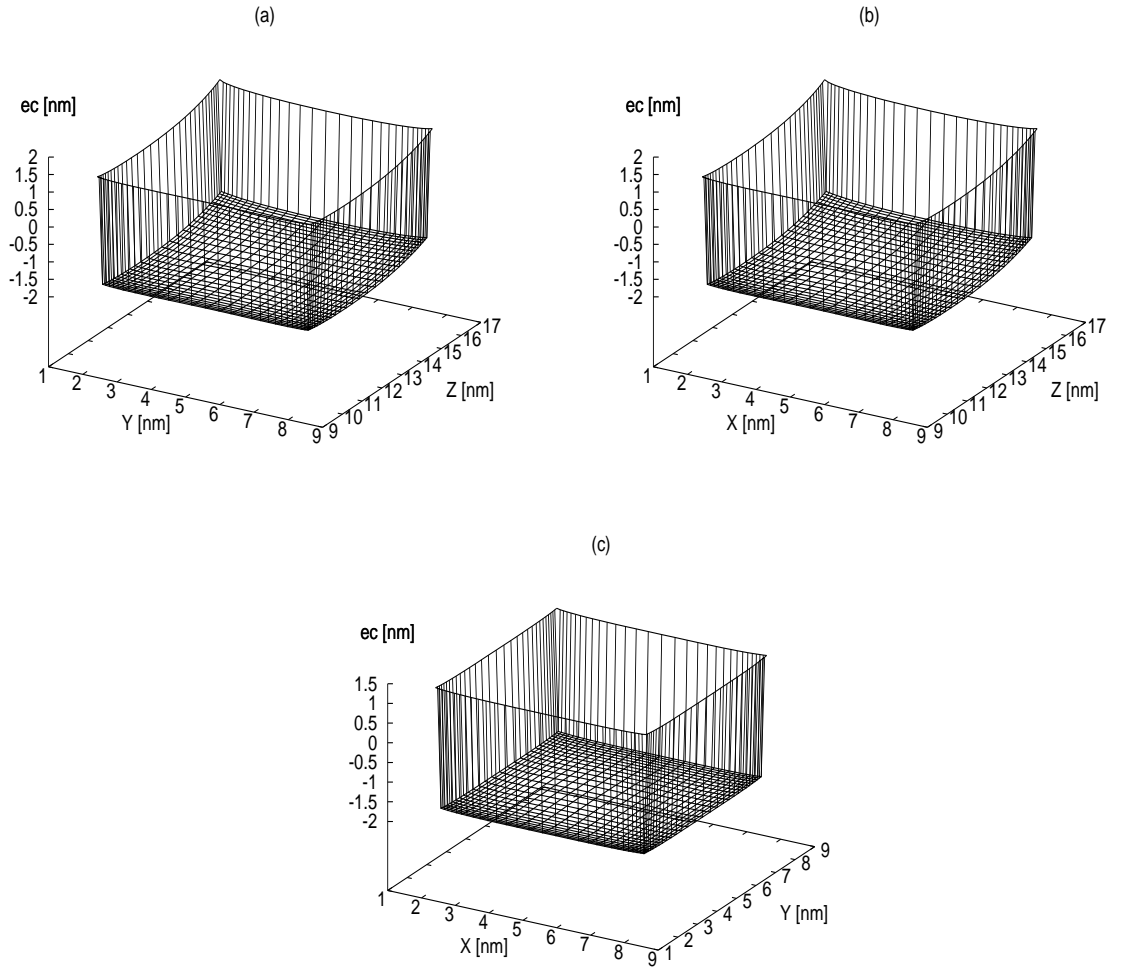


Figura 5.5: Potenziali di confinamento passati in ingresso ad *Antischo3d()*. In (a) sezione a $x=5$ nm, in (b) sezione a $y=5$ nm e in (c) sezione a $z=13$ nm.

questi il solutore restituisce le autofunzioni e gli autovalori di singola particella.

Gli elettroni che si trovano sul fondo della banda, vedranno un confinamento praticamente infinito. Per questi possiamo dire che vale [5]:

$$\epsilon_i = 3 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2 \quad (5.1)$$

dove a è il lato del dot, n è il numero quantico principale. Considerando $m=0.19 \, m_0$, otteniamo $\epsilon_0 = 0.165 \, [\text{eV}]$ contro un valore ottenuto dal simulatore pari a $0.1753 \, [\text{eV}]$. Questo porta un errore pari a $\simeq 6\%$.

5. Simulazione di quantum dot in Silicio in campo magnetico

Risultati delle simulazioni

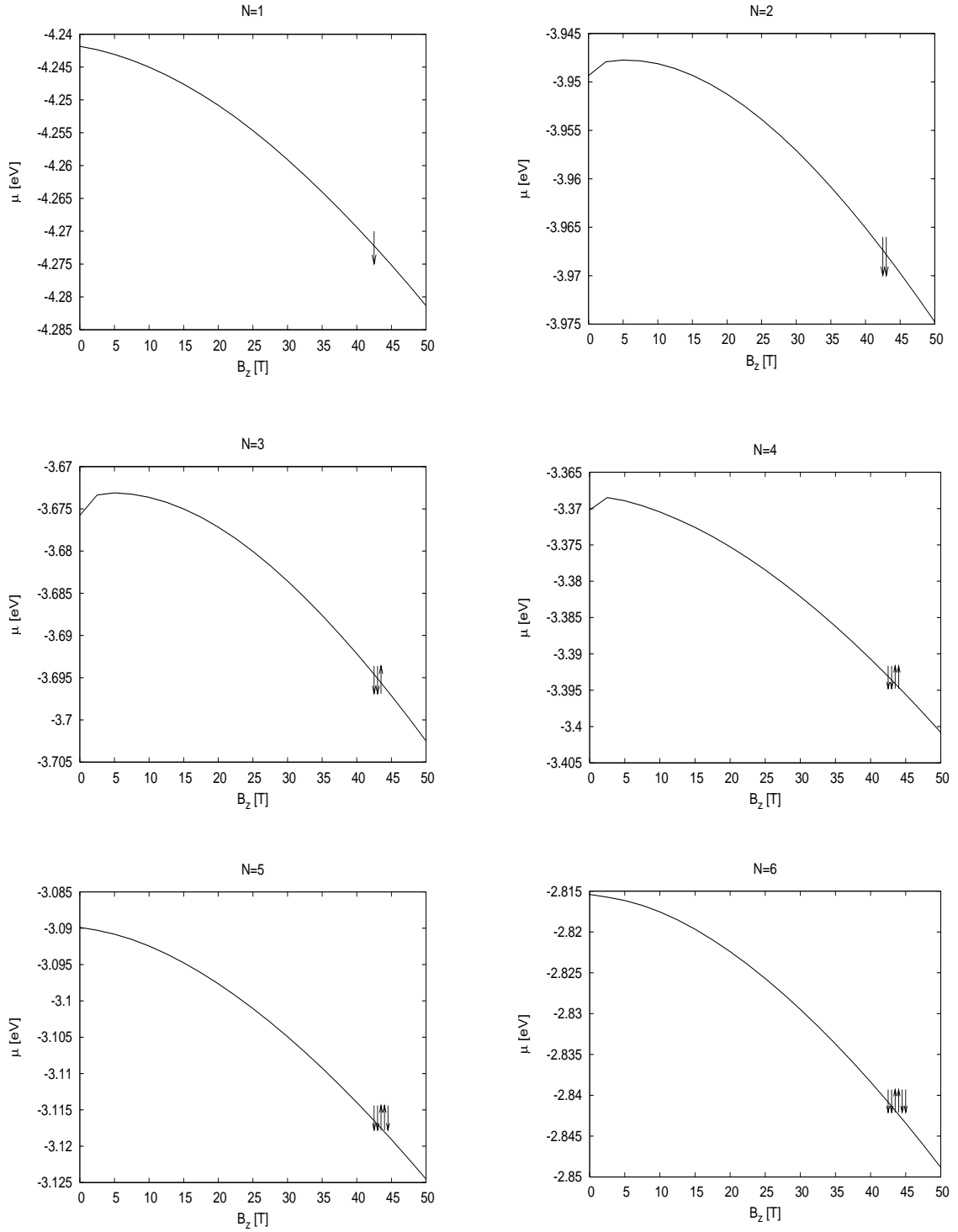


Figura 5.6: Potenziale elettrochimico in funzione del campo magnetico da 1 a 6 elettroni.

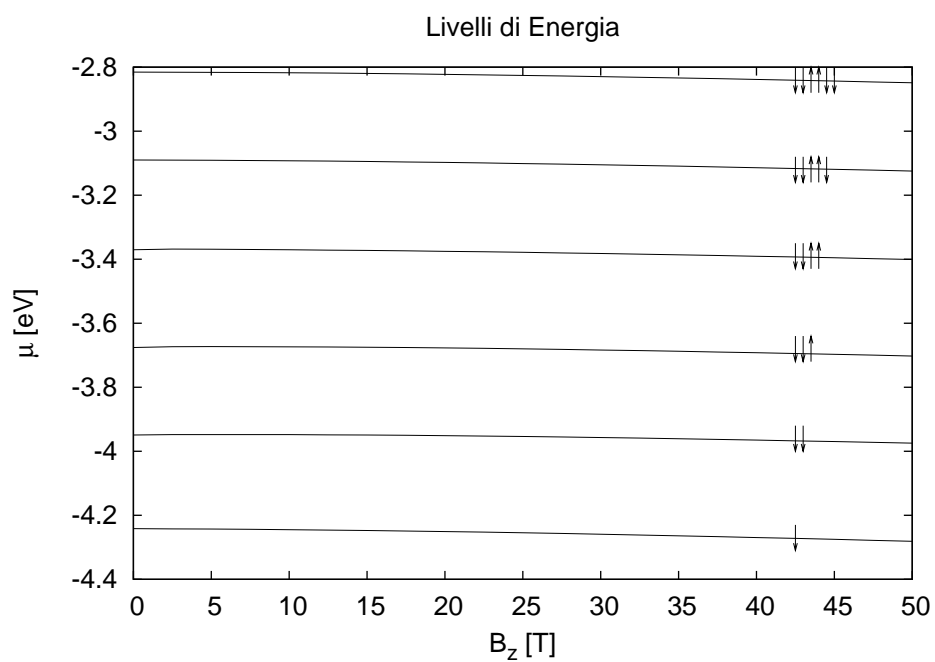


Figura 5.7: Livelli di energia.

Capitolo 6

Simulazione del Nonoverlapped-MOS a canale ultra corto

Riportiamo in questo capitolo i risultati ottenuti dalle simulazioni di un Mos con regioni di gate-source-drain non sovrapposte.

Ci interessa particolarmente indagare il comportamento di singolo elettrone del dispositivo sia al variare del caricamento degli elettroni nel canale e sia al variare del campo magnetico.

6.1 Geometrie e drogaggi

Presentiamo di seguito il layout del dispositivo con inclusi i drogaggi.

Di seguito riportiamo i file di ingresso per il simulatore:

```
1 numero di zone lungo x
1 zona
0 xiniziale
50 xfinale
1 deltainiziale
1 deltafinale
1 numero di zone lungo y
1 zona
0 yiniziale
83 yfinale
1 deltainiziale
```

6. Simulazione del Nonoverlapped-MOS a canale ultra corto

Geometrie e drogaggi

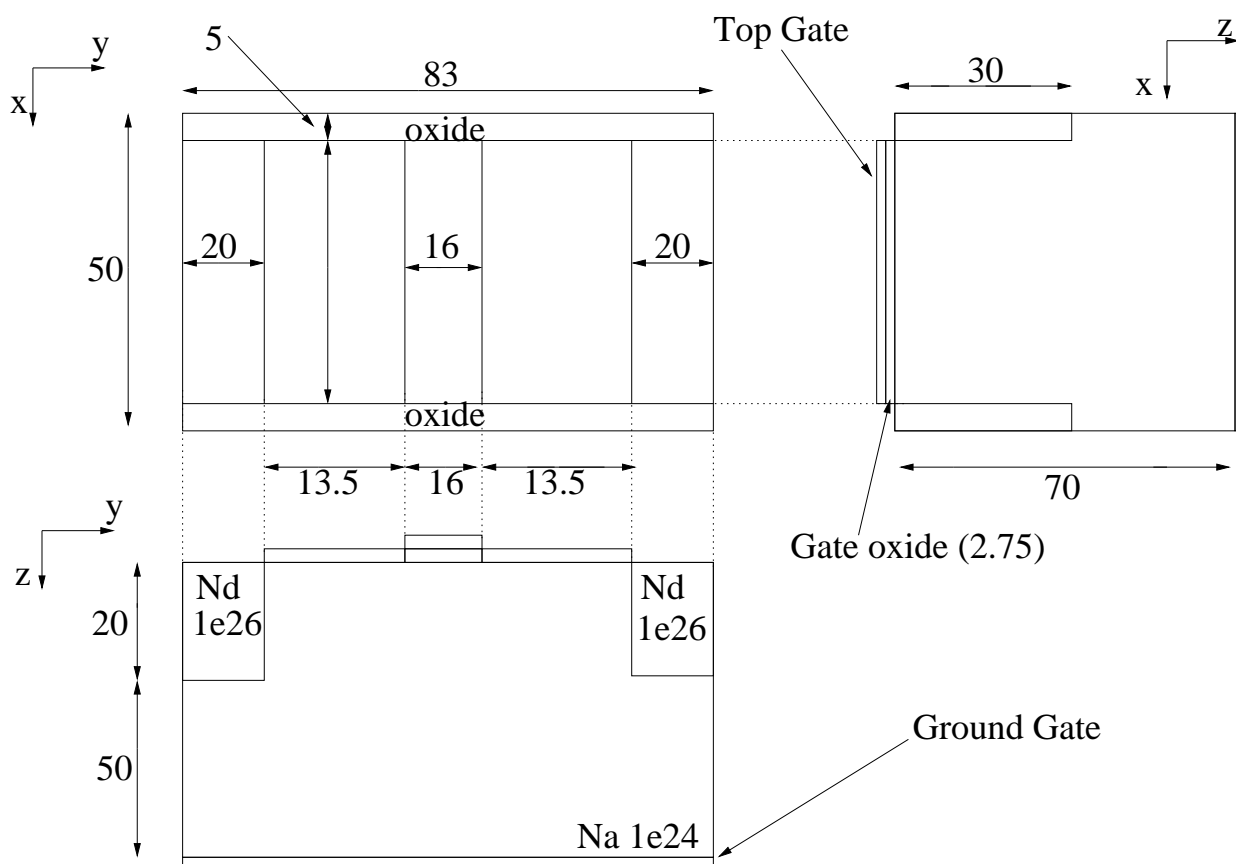


Figura 6.1: Proponiamo il layout delle tre sezioni del Non-Overlapped Mos indicante i drogaggi.

6. Simulazione del Nonoverlapped-MOS a canale ultra corto

Geometrie e drogaggi

```
1 deltafinale
3 numero di zone lungo z
1 zona
0 ziniziale
2.75 zfinale
0.75 deltainiziale
0.1 deltafinale
2 zona
2.75 ziniziale
8 zfinale
0.1 deltainiziale
0.5 deltafinale
3 zona
8 ziniziale
60 zfinale
0.5 deltainiziale
5 deltafinale
```

```
ps
prev
tolldomn 1e-1
normad 1e-3
poissnorm 1e-3
complete
magfield 1e-5
giromag 2
```

```
solid oxide
{
  sio2
  zmax 2.75
}
```

```
solid bulk
{
  silicon
  zmin 2.75
  na 1e24 nd 0
}
```

```
solid oxide trench
{
  sio2
  xmax 5
  zmax 40
}
```

```
solid oxide trench
{
  sio2
  xmin 45
  zmax 40
}
```

```
solid source
{
  silicon
  xmin 5 xmax 44.9
  ymax 19.9
  zmin 2.75 zmax 20
  nd 1e26 na 0
}
```

```
solid drain
{
  silicon
  xmin 5 xmax 44.9
  ymin 63
  zmin 2.75 zmax 20
  nd 1e26 na 0
}
```

```
gate massa
{
  zmin 60
  workf 4.1
  Ef 0.0
}

gate top
{
  xmin 5.1 xmax 45
  ymin 33.5 ymax 49.5
  zmax 0
  workf 4.1
  Ef -0.8
}

gate contact source
{
  xmin 5 xmax 45
  ymax 20
  zmax 2.75
  workf 4.1
  Ef 0.0
}

gate contact drain
{
  xmin 5 xmax 45
  ymin 63
  zmax 2.75
  workf 4.1
  Ef 0.0
}

region
{
  3d
  xmin 3 xmax 47
  ymin 30 ymax 53
  zmin 2.3 zmax 10
  electrons 1
}
```

Per quanto riguarda le geometrie e i droaggi ci riferiamo allo studio sperimentale riportato in [3]. Le zone di Non overlap sono lunghe 13.5 nm, il gate è lungo 16 nm.

6.2 L'esperimento

Il lavoro che prendiamo in considerazione è riportato in [3]. Studiamo un MOS con lunghezza di canale $L=16$ nm. In 6.2 ne riportiamo la SEM.

Il processo tecnologico che ha portato alla definizione di un gate lungo $L=16$ nm non ha consentito però di ridurre la larghezza del canale. Infatti

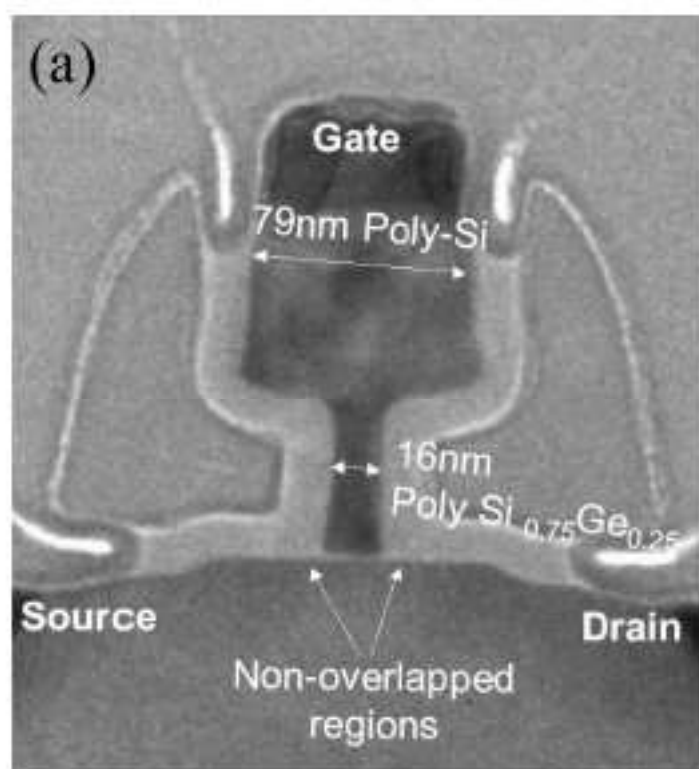


Figura 6.2: SEM del transistor MOS con lunghezza di canale $L=16$ nm. Il bulk è fatto di silicio, ed in particolare notiamo che le regioni di source e drain non sono sottoposte al gate. Fig. 1a da [3]

questa è pari a $10\mu\text{m}$.

Le prove sperimentali consistono nell'analisi spettrografica della conduttanza: fissata una piccola tensione V_{ds} , variamo la tensione di gate e misuriamo la corrente I_{ds} . La 6.3 mostra l'andamento della I_{ds} al variare della tensione di gate. Il tipico andamento oscillatorio è dovuto al coulomb blockade.

E' necessario fare una preliminare osservazione: la larghezza $W=10\mu\text{m}$ non rientra nel range tipico delle lunghezze nanometriche. Allo stesso tempo si osserva un comportamento di coulomb blockade, che è caratteristico dei dispositivi nanometrici. Questa contraddizione si supera facendo l'ipotesi che l'intero transistor possa essere visto come insieme di SET posti in parallelo. Questa ipotesi trova giustificazione nella irregolarità del periodo di oscillazione della corrente. Infatti, se supponiamo che i SET che costituiscono il canale siano di varie dimensioni, allora avremo che ognuno di essi sarà caratterizzato da una propria charging energy E_c .

Al fine di determinare la charging energy del dispositivo, ricorriamo allo studio statistico della ΔV_g , ricavandone valore medio e varianza, come esposto nella 6.3.

Quanto sopra detto giustifica la nostra scelta di impostare la larghezza di canale a 40 nm.

6.3 Risultati delle simulazioni

Il principio di funzionamento di singolo elettrone del dispositivo è il seguente: applicando una tensione V_g positiva sul gate si abbassa il potenziale del canale, mentre nelle regioni di non overlap l'energia si mantiene inalterata. Questo produce una buca di potenziale che può confinare elettroni sotto il gate. La 6.4 mostra questo comportamento per una tensione di gate appli-

6. Simulazione del Nonoverlapped-MOS a canale ultra corto

Risultati delle simulazioni

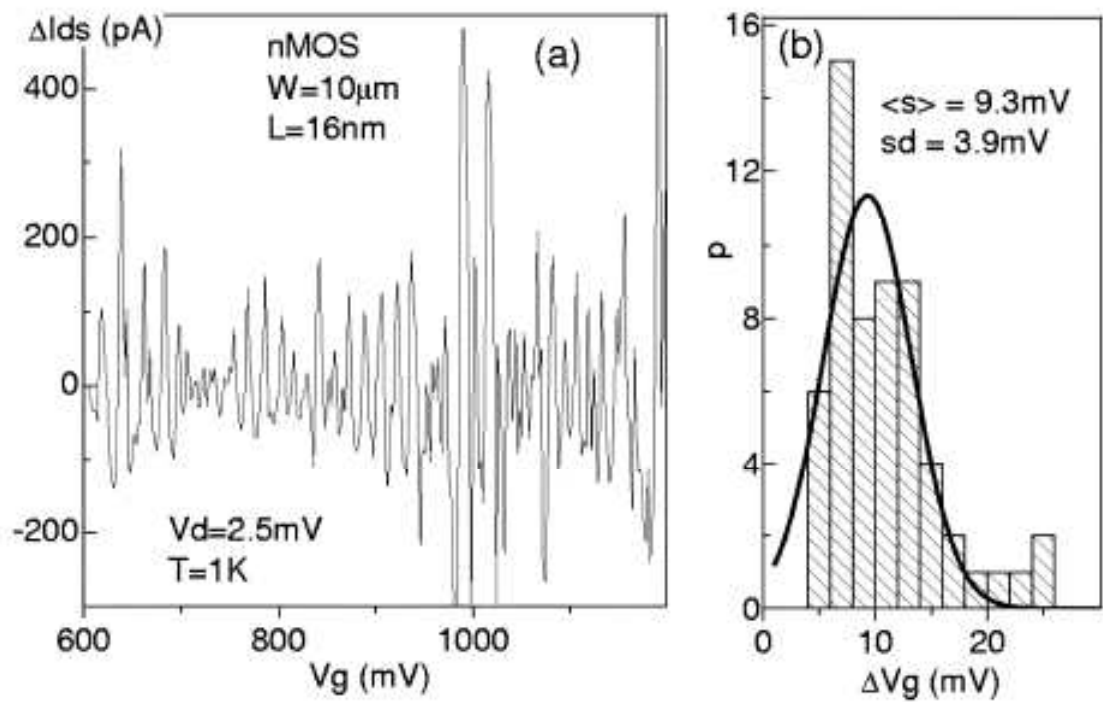


Figura 6.3: In a é mostrato il grafico della misura della conduttanza per una struttura MOS con larghezza di canale $W=10\mu\text{m}$ e una lunghezza $L=16\text{ nm}$. Mentre in b è riportato lo studio statistico del periodo delle oscillazioni della conduttanza.

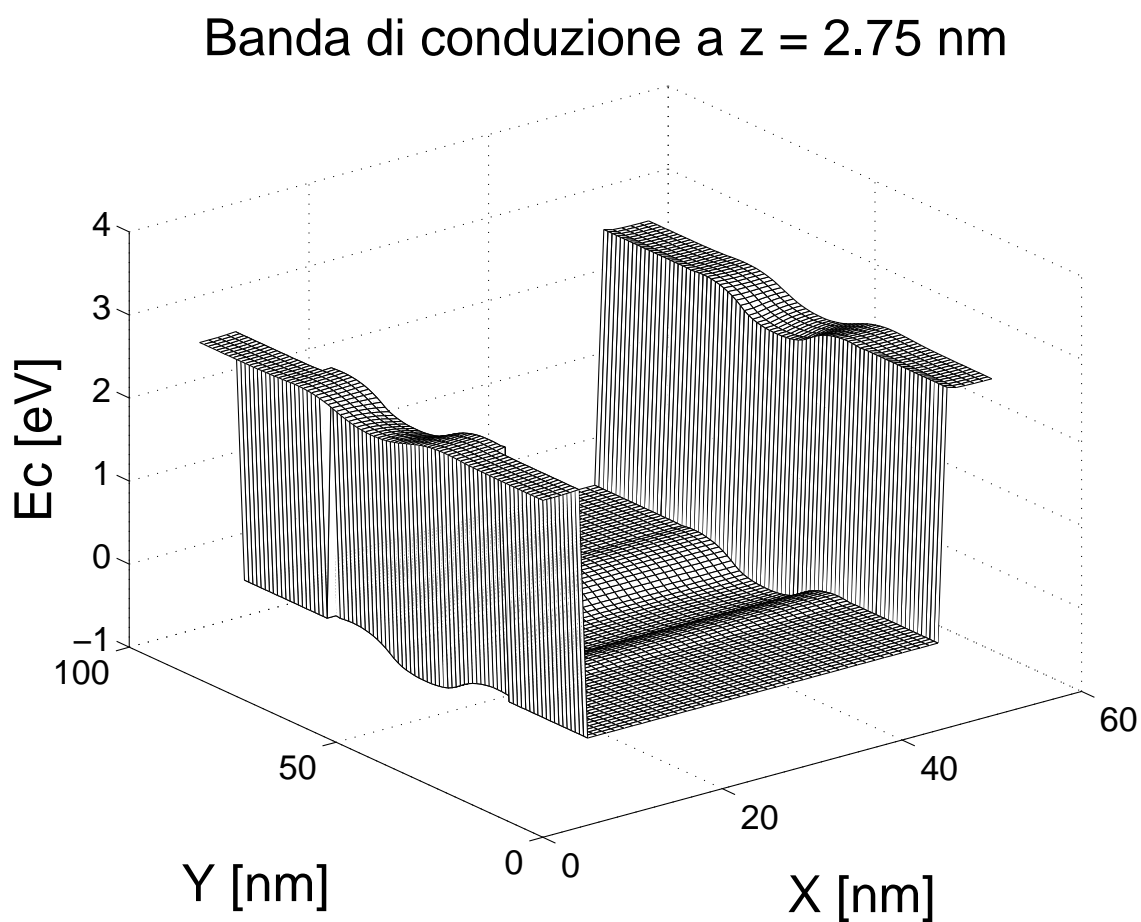


Figura 6.4: Banda di conduzione del NonOverlapped Mos con $B_z = 0.5$ T e con $N=1$ elettroni sotto il canale. Sezione a $z=2.75$ nm.

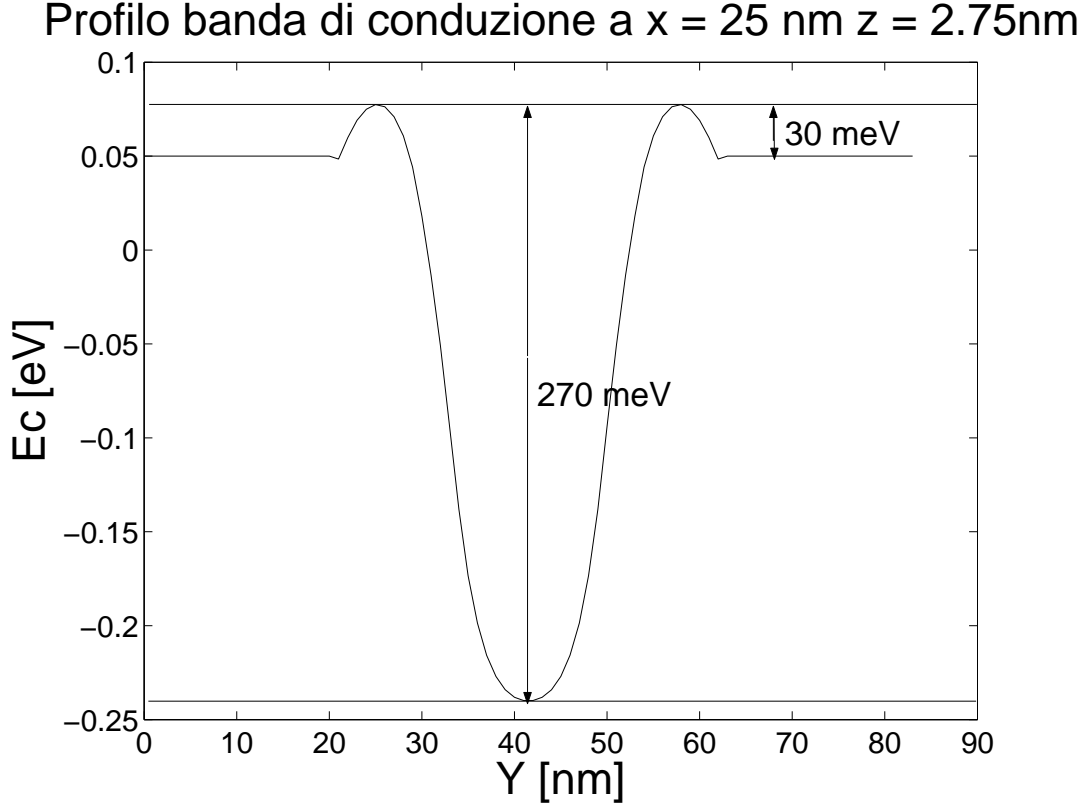


Figura 6.5: Profilo della Banda di Conduzione lungo la direzione a $z=2.75$ nm e $x=25$ nm, con campo magnetico $B_z = 0.5$ T e $N=1$ elettroni sotto il canale.

cata pari a 0,8 V. La 6.5 mostra il potenziale lungo la direzione a $z=2.75$ nm e $x=25$ nm. In particolare notiamo l'innalzarsi di due barriere tunnel alte $\simeq 30$ meV nelle regioni di non overlap dot-source e dot-drain. Il confinamento nel dot ha una altezza pari a $\simeq 270$ meV.

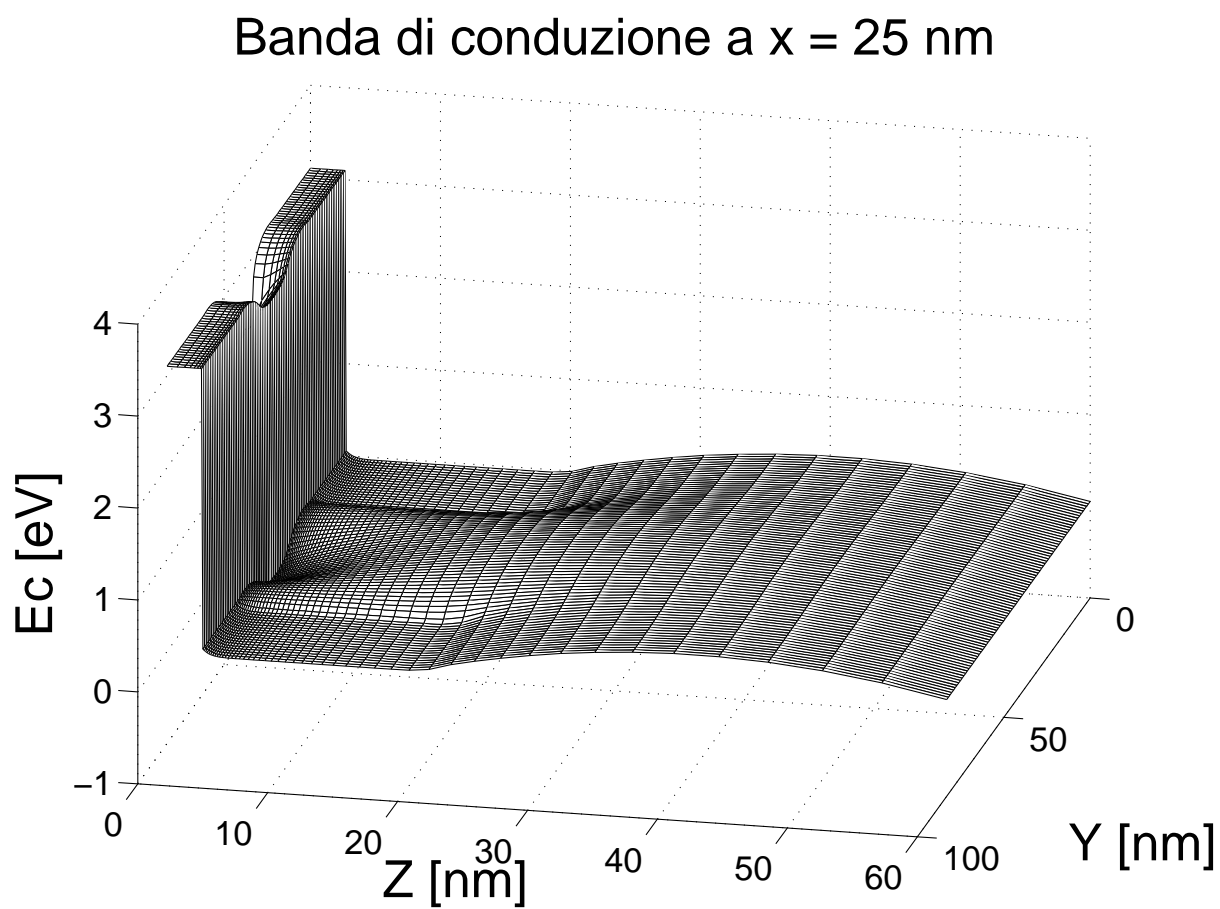


Figura 6.6: Banda di conduzione del NonOverlapped Mos con $B_z = 0.5$ T e con $N=1$ elettroni sotto il canale. Sezione a $x=25$ nm.

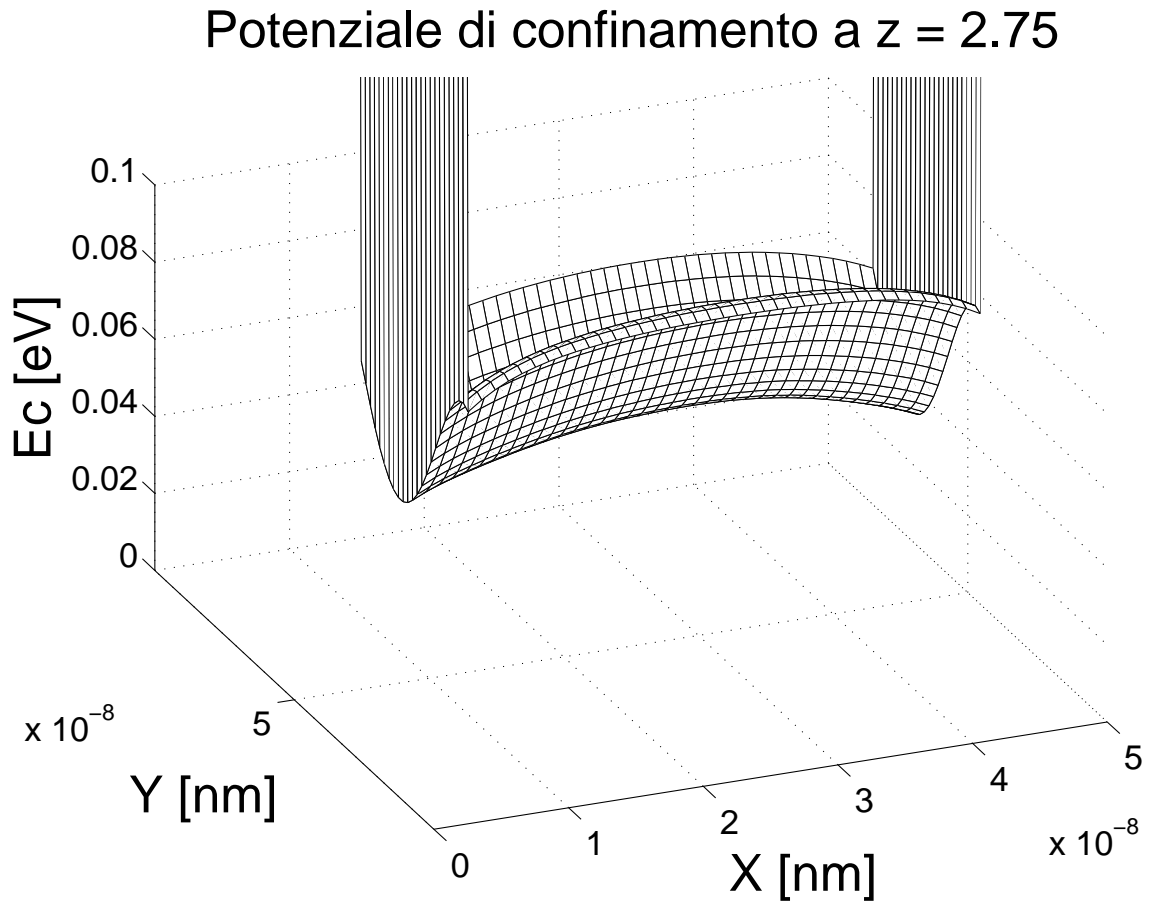


Figura 6.7: Sezione col piano a $z=2.75$ nm della banda di conduzione nelle regione quantistica 3D. Le condizioni di lavoro sono $V_g = 0.8$ V e $B_z = 0.5$ T.

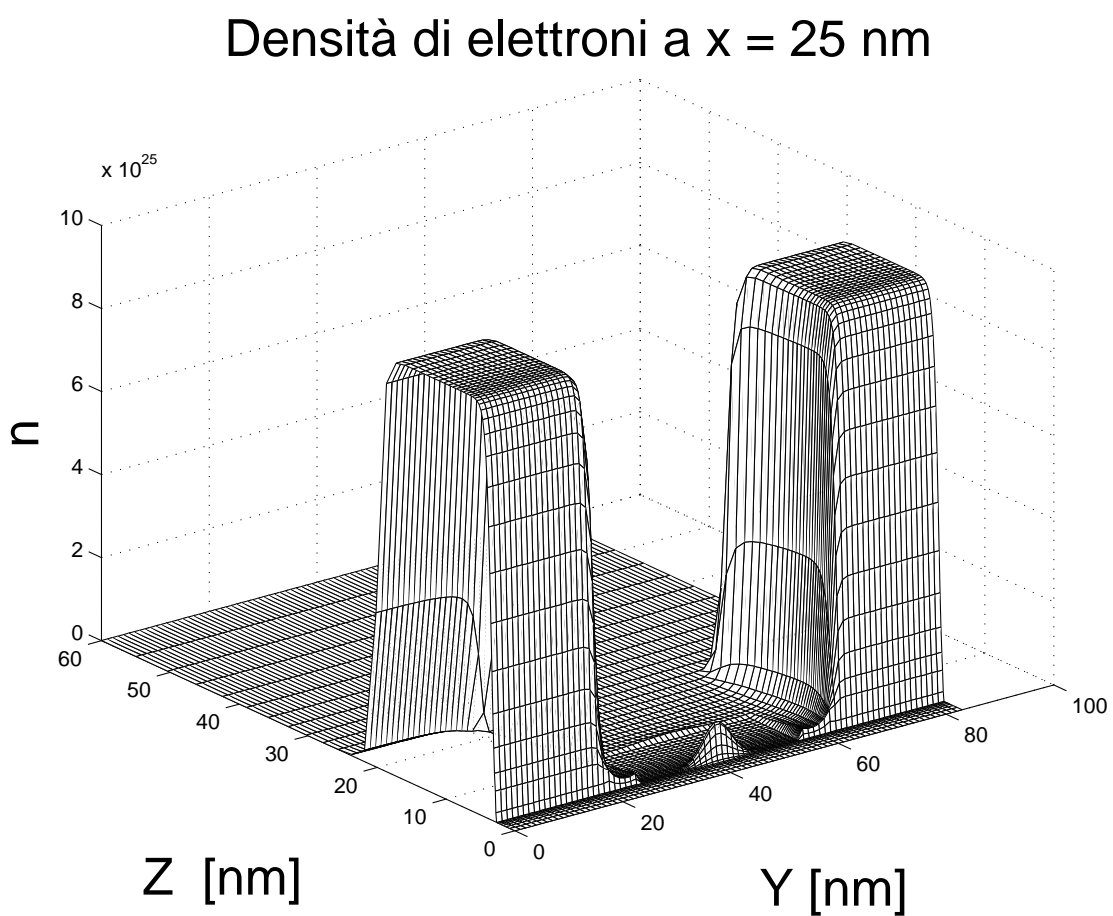


Figura 6.8: Sezione col piano $x=25$ nm della densità di elettroni. Le condizioni di lavoro sono $v_g = 0.8$ V e $B_z = 0.5$ T.

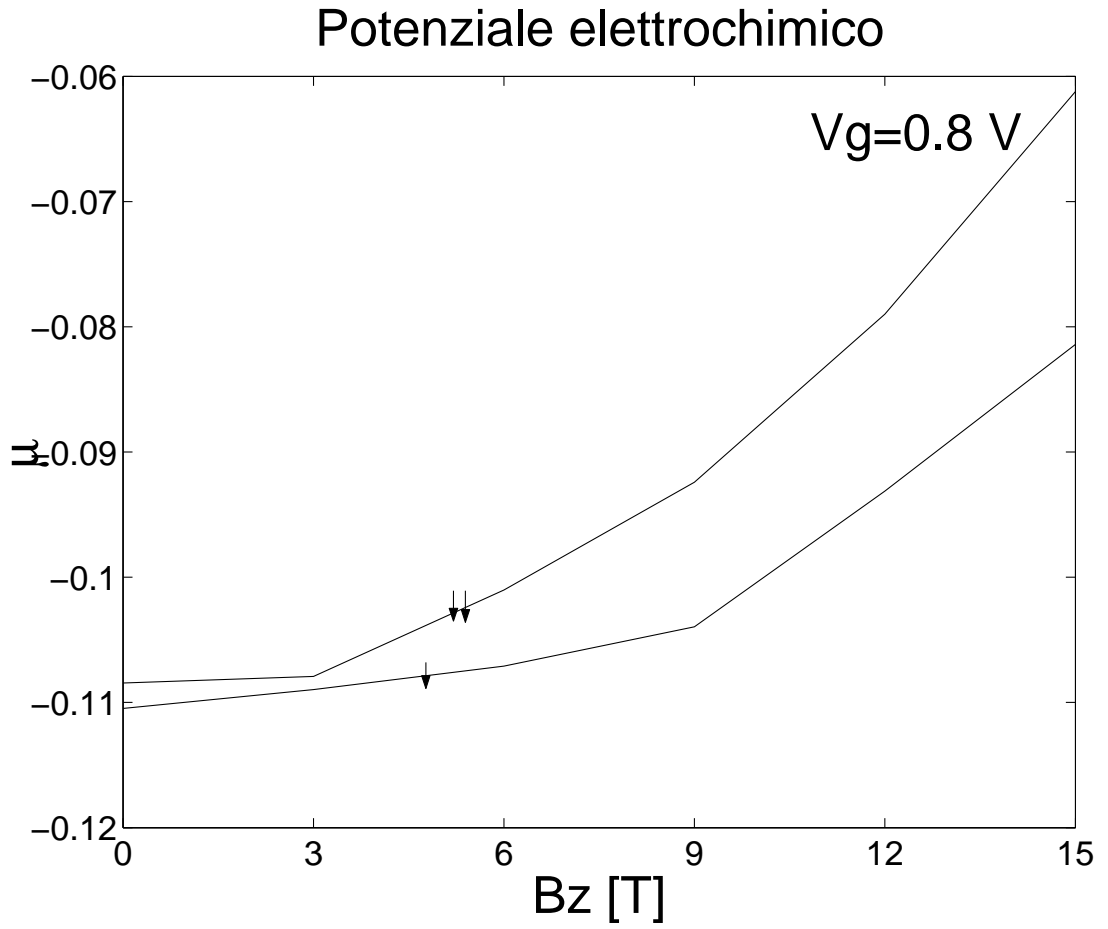


Figura 6.9: Potenziale elettrochimico μ [eV] per $N=1$ e $N=2$ elettroni nel dot, al variare del campo magnetico B_z [T] con passo 3 T e con tensione di gate $V_g = 0.8 \text{ V}$.

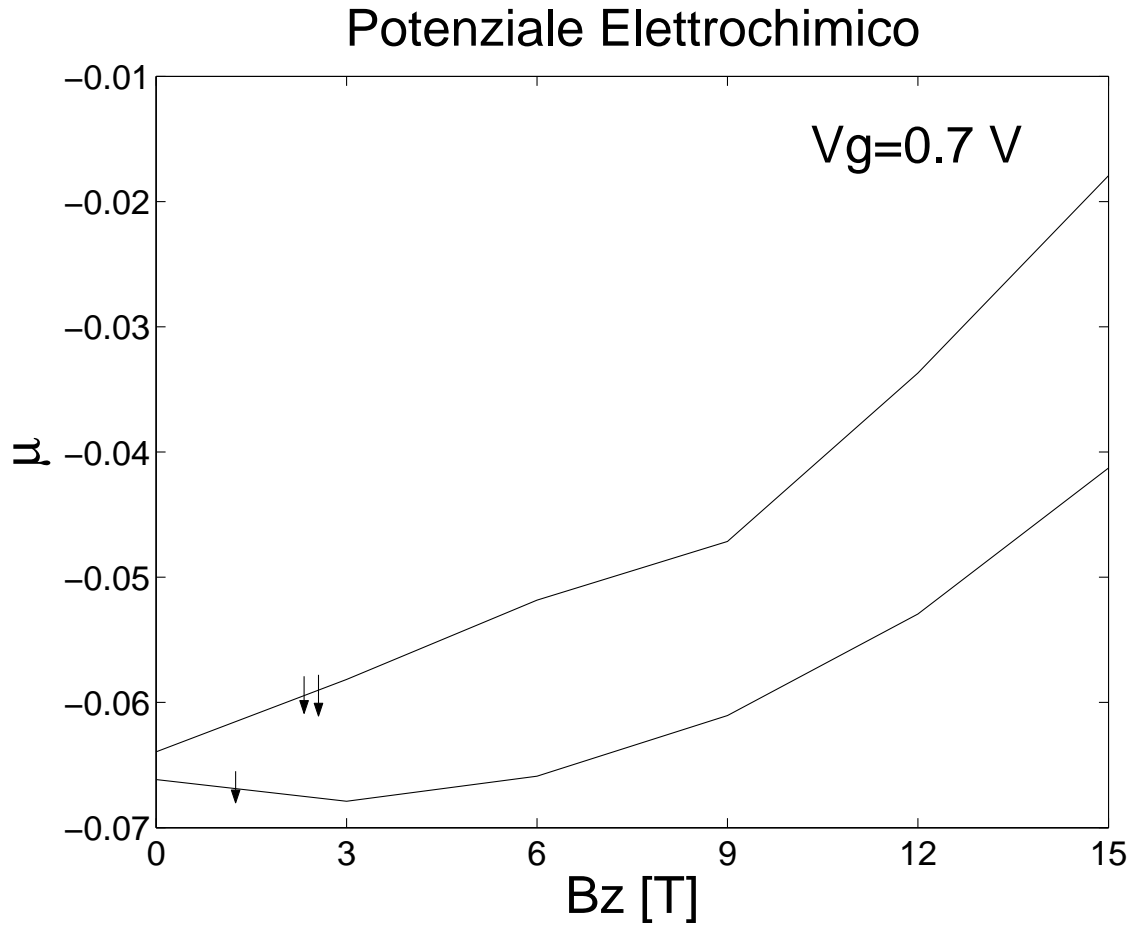


Figura 6.10: Potenziale elettrochimico μ [eV] per $N=1$ e $N=2$ elettroni nel dot, al variare del campo magnetico B_z [T] con passo 3 T e con tensione di gate $V_g = 0.7 \text{ V}$.

Conclusioni

Il lavoro di tesi ci ha visto impegnati nella scrittura di codice da inserire nel simulatore, che consentisse di eseguire calcoli con la Current Spin Density Functional Theory.

Ultimata la stesura del codice, abbiamo testato il simulatore su alcune strutture di prova: un semplice quantum dot e il non-overlapped MOS a canale ultracorto.

Appendice A

I file di ingresso

Proponiamo di seguito un esempio di gggriglia.dat:

```
4 numero di zone lungo x
1 zona
0 xiniziale
2 xfinale
0.9 deltainiziale
0.1 deltafinale
2 zona
2 xiniziale
5 xfinale
0.1 deltainiziale
0.4 deltafinale
3 zona
5 xiniziale
8 xfinale
0.4 deltainiziale
0.1 deltafinale
4 zona
8 xiniziale
10 xfinale
0.1 deltainiziale
0.9 deltafinale
4 numero di zone lungo y
1 zona
0 yiniziale
2 yfinale
0.9 deltainiziale
0.1 deltafinale
2 zona
2 yiniziale
5 yfinale
0.1 deltainiziale
0.4 deltafinale
3 zona
5 yiniziale
8 yfinale
0.4 deltainiziale
0.1 deltafinale
4 zona
8 yiniziale
10 yfinale
0.1 deltainiziale
0.9 deltafinale
4 numero di zone lungo z
1 zona
0 ziniziale
10 zfinale
```

A. I file di ingresso

```
2.5 deltainiziale
0.1 deltafinale
2 zona
10 ziniziale
13 zfinale
0.1 deltainiziale
0.4 deltafinale
3 zona
13 ziniziale
16 deltafinale
0.4 deltainiziale
0.1 deltafinale
4 zona
16 ziniziale
50 zfinale
0.1 deltainiziale
5 deltafinale
```

La sintassi è del tipo: *valore_variabile nome_variabile*

Definiamo la griglia degli assi nell'ordine x , y e z . La definizione di ogni asse inizia con:

<n> numero di zone lungo <axes>

dove al posto di <axes> mettiamo il nome dell'asse (x , y o z), e al posto di <n> il numero di zone dell'asse per le quali vogliamo una certa discretizzazione. Ogni zona è numerata in ordine progressivo tramite la riga:

<n> zona

dove al posto di <n> mettiamo il numero della zona. Per ogni zona bisogna definire la coordinata iniziale e finale:

```
<start> <axes>iniziale
<end>   <axes>finale
```

<start> e <end> devono essere sostituiti dalle rispettive coordinate iniziali e finali, mentre al posto di <axes> poniamo il nome dell'asse che stiamo definendo. Ed infine, per ogni zona dobbiamo specificare il passo iniziale e finale:

A. I file di ingresso

```
<delta-start> deltainiziale  
<delta-end>   deltafinale
```

dove al posto di <delta-start> e <delta-end> mettiamo i passi iniziali e finali della griglia.

Due buone regole sono di adottare un passo quanto più possibile piccolo al confine tra due zone diverse e il passo finale di una zona dovrà essere uguale al passo iniziale di un'altra (in particolar modo quando si passa attraverso l'interfaccia tra due materiali differenti).

La definizione di griglie particolarmente fitte porta a risultati più accurati, ma dobbiamo trovare un giusto compromesso con la disponibilità di memoria e potenza di calcolo. Questi due ultimi aspetti possono risultare veramente proibitivi.

Lanciando una simulazione con una griglia 3D maggiore o uguale a 64x64x64 punti sotto ambiente Linux, può capitare che venga interrotto il flusso di programma con il messaggio d'errore:

```
segmentation fault
```

Questo è dovuto alla mancanza di memoria Stack. Può essere risolto con il comando:

```
ulimit -S -s size
```

dove al posto di <size> poniamo la capacità di Stack di cui necessitiamo. Ovviamente se la memoria fisica non ha capacità sufficiente, la simulazione non può essere lanciata su quella macchina.

Riportiamo di seguito un esempio di file "ssstref.dat":

A. I file di ingresso

```
ps
prev
tolldomn 1e-1
normad 1e-4
poissnorm 1e-4
complete

magfield 25
giromag 2

solid oxide
{
  sio2
  nulln nullp
}

solid bulk
{
  silicon
  zmin 18
  na 1e25
}

solid dot
{
  silicon
  xmin 2 xmax 8
  ymin 2 ymax 8
  zmin 10 zmax 16
  nd 1e26
}

gate massa
{
  zmin 50
  workf 4.1
}

gate top
{
  zmax 0
  workf 4.1
}

region
{
  3d
  xmin 1.8 xmax 8.2
  ymin 1.8 ymax 8.2
  zmin 9.9 zmax 16.2
  electrons 3
}
```

Le regole di sintassi prevedono che se una riga inizia con:

```
#<blankspace>
```

allora è considerata commento.

La sintassi di sstref.dat è un pò più complessa. Le prime due righe:

A. I file di ingresso

```
ps
prev
```

impostano il simulatore all'analisi quantistica partendo da una soluzione precedentemente calcolato. Le righe:

```
toldomm 1e-1
normad 1e-3
poissnorm 1e-3
```

impostano le tolleranze dei metodi iterativi di risoluzione delle equazioni.

Definiamo *solido* una regione omogenea del dispositivo che non sia un gate o una *region* di analisi. Per definire un solido usiamo la seguente dichiarazione di record:

```
solid <comment>
{
  .
  .
}
```

dove <comment> può essere una qualunque parola che etichetti la regione. La regione tra le parentesi graffe contiene la definizione del solido. Ad esempio, le parole chiave *silicon* e *sio2* definiscono rispettivamente una regione di silicio e una regione di diossido di silicio. Per ogni solido dobbiamo definire i limiti geometrici delle regioni:

```
xmin <xm> xfin <xf>
ymin <ym> yfin <yf>
zmin <zm> zfin <zf>
```

dove al posto di <xm> e <xf> poniamo rispettivamente la ascissa iniziale e finale del solido (la stessa regola è applicata ai restanti assi y e z). Nel caso in cui il solido sia di silicio, bisogna definire anche i drogaggi:

```
na <num>
```


A. I file di ingresso

definisce un drogaggio con atomi accettori con concentrazione pari a $\langle \text{num} \rangle$ $[\text{m}^{-3}]$. Nel caso di drogaggio con atomi donatori:

```
nd <num>
```

I gate vengono definiti mediante il codice:

```
gate <comment>
{
  :
  :
}
```

All'interno del record gate dobbiamo definire il tipo di materiale che lo costituisce. Ad esempio *poly*. Se non è presente nessuna dichiarazione il gate è considerato di alluminio. Per un gate bisogna inoltre definire la funzione lavoro:

```
workf <val>
```

dove al posto di $\langle \text{val} \rangle$ mettiamo il valore della funzione lavoro del gate definito. Allo stesso modo, per un gate bisogna definire il livello di Fermi:

```
Ef <val>
```

Facciamo attenzione che i valori di E_f e ϕ del primo gate definito sono assunti come riferimento rispettivamente delle energie e dei potenziali.

Per definire una regione di analisi scriviamo il seguente codice:

```
region <comment>
{
  :
  :
}
```

A. I file di ingresso

All'interno del record `region` definiamo il tipo di analisi quantistica 3D mediante la linea di codice:

```
3D
```

Per quanto riguarda la definizione dei confini geometrici il codice segue le stesse regole viste per il record di tipo *solido*. Ed infine, bisogna specificare il numero di elettroni contenuti nella *region*:

```
electrons <num>
```

definiscono rispettivamente l'analisi quantistica 3D e il numero di elettroni della regione.

Appendice B

Codici per il calcolo dei potenziali di XC secondo la formulazione di Koskinen

Riportiamo di seguito l'header file "exchange.h":

```
#include <stdio.h>
#include <math.h>
#include <stdlib.h>
#include "costanti.h"
#include "device_mapping.h"
#include "physical_quantities.h"
#include "soliduzzo.h"
#include "nrutil.h"

typedef double (*fpp)(double,double,double,double,double);
typedef void (*dsud)( device_mapping d,double *,int , int , int , double *,int);

void XCup(physical_quantities p, device_mapping d,soliduzzo *mat,
double ***eigenfun,int**eigensort,int zona);
void XCdown(physical_quantities p, device_mapping d,soliduzzo *mat,
double ***eigenfun,int **eigensort,int zona);
void dsudx( device_mapping d,double *vector,int nx, int ny, int nz, double *fun, int zona);
void dsudy( device_mapping d,double *vector,int nx, int ny, int nz, double *fun, int zona);
void dsudz( device_mapping d,double *vector,int nx, int ny, int nz, double *fun, int zona);
double derive1(double nup,double ndown,double B,double massr,double epsr);
double derive(fpp p,double nup,double ndown,double B,double massr,double epsr,int tipo);
void dencurr2d(physical_quantities p, device_mapping d, double *Jp3d, int zona);
void dencurr( double *Jp, double ***eigenfun,int **eigensort,soliduzzo *mat,
device_mapping d, physical_quantities p, int zona);
double Exctc(double nup,double ndown, double B,double massr,double epsr);
double Exclwm(double nup, double ndown, double B,double massr,double epsr);
double sgn(double);
double modulo( double );
void Intcar(physical_quantities p, device_mapping d,
```

B. Codici per il calcolo dei potenziali di XC secondo la formulazione di Koskinen

```
int zona, double *carup, double *cardown);
```

Riportiamo di seguito il sorgente “exchange.c”:

```
#include "exchange.h"

void XCup(physical_quantities p, device_mapping d, soliduzzo *mat,
double ***eigenfun, int **eigensort, int zona)
{
    int zona3d=d.zsr[zona];
    int i,j,l;
    int punto;
    fpp fp1,fp2,fp3;
    double Vxcuptc,Vxcuplwm,Vxcup;
    double ncar,nup,ndown,epsr,masr,dist;
    double Exc,dv,temp;
    double *carup,*cardown,B;
    double *potvec,*Jp;

    fp1=Exctc;
    fp2=Exclwm;
    fp3=ExcK;

    potvec=dvector(0,2*d.Nps[zona]-1);
    Jp=dvector(0,3*d.Nps[zona]-1);

    potvect(p,d,mat,potvec,zona);
    dencurr(Jp,eigenfun,eigensort,mat,d,p,zona);
    dencurr2d(p,d,Jp,zona);

    B=*p.Bz;

    for(j=0;j<d.Nps[zona];j++)
    {
        punto=d.corrSP[zona][j];
        epsr=mat[d.solido[d.ele[punto]]].eps/eps0;
        masr=mat[d.solido[d.ele[punto]]].me2/m0;
        dist=(d.dist[punto][4]+d.dist[punto][5])/2;

        dv=0;
        for(l=0;l<8;l++)
            dv+=d.dVe[punto][l];

        nup=p.ncar[0][zona3d][j]*dist/dv;
        ndown=p.ncar[1][zona3d][j]*dist/dv;
        temp=q*(Jp[j]*potvec[j]+Jp[j+d.Nps[zona]]*potvec[j+d.Nps[zona]])/(nup+ndown);
        Vxcup=(fp3)(nup,ndown,B,masr,epsr)+(nup+ndown)*derive(fp3,nup,ndown,B,masr,epsr,0)-temp;

        if( Vxcup == Vxcup) //Controllo sul risultato//
            p.XC[0][zona3d][j]=Vxcup;
        else
        {
            p.XC[0][zona3d][j]=0.0;
        }
    }
    free_dvector(potvec,0,2*d.Nps[zona]-1);
    free_dvector(Jp,0,3*d.Nps[zona]-1);
    return;
}

//-----//
```

B. Codici per il calcolo dei potenziali di XC secondo la formulazione di Koskinen

```
void XCdown(physical_quantities p, device_mapping d, soliduzzo *mat,
            double ***eigenfun, int **eigensort, int zona)
{
    int zona3d=d.zsr[zona];
    int i,j,l;
    int punto;
    fpp fp1,fp2,fp3;
    double Vxcdowntc,Vxcdownlwm,Vxcdown;
    double ncar,nup,ndown,epsr,massr,dist;
    double Exc,dv,temp;
    double *carup,*cardown,B;
    double *potvec,*Jp;

    fp1=Exctc;
    fp2=Exclwm;
    fp3=ExcK;

    potvec=dvector(0,2*d.Nps[zona]-1);
    Jp=dvector(0,3*d.Nps[zona]-1);

    potvect(p,d,mat,potvec,zona);
    dencurr(Jp,eigenfun,eigensort,mat,d,p,zona);
    dencurr2d(p,d,Jp,zona);

    B=*p.Bz;
    for(j=0;j<d.Nps[zona];j++)
    {
        punto=d.corrSP[zona][j];
        epsr=mat[d.solido[d.ele[punto]]].eps/eps0;
        massr=mat[d.solido[d.ele[punto]]].me2/m0;

        dv=0;
        for(l=0;l<8;l++)
            dv+=d.dVe[punto][l];
        dist=(d.dist[punto][4]+d.dist[punto][5])/2;
        nup=p.ncar[0][zona3d][j]*dist/dv;
        ndown=p.ncar[1][zona3d][j]*dist/dv;
        temp=q*(Jp[j]*potvec[j]+Jp[j+d.Nps[zona]]*potvec[j+d.Nps[zona]])/(nup+ndown);
        Vxcdown=(fp3)(nup,ndown,B,massr,epsr)+
            (nup+ndown)*derive(fp3,nup,ndown,B,massr,epsr,1)-temp;

        if (Vxcdown == Vxcdown) //Controllo sul risultato di uscita//
            p.XC[1][zona3d][j]=Vxcdown;
        else
        {
            p.XC[1][zona3d][j]=0.0;
        }
    }

    free_dvector(potvec,0,2*d.Nps[zona]-1);
    free_dvector(Jp,0,3*d.Nps[zona]-1);
    return;
}

//-----//

void dencurr( double *Jp, double ***eigenfun, int **eigensort, soliduzzo *mat,
            device_mapping d, physical_quantities p, int zona)
{
    //Restituisce la densita di corrente paramagnetica//

    dsud *diff;
    double mass;
    double** axis;
    double *dummy1,*dummy2,dummy3;
    double fun;
```

B. Codici per il calcolo dei potenziali di XC secondo la formulazione di Koskinen

```
int i,s,l,j,k,index,index2,punto;
int min,mmin,eigen,spin;

diff=(dsud*)calloc(3,sizeof(dsud)); //Alloco memoria//
diff[0]=dsudx;diff[1]=dsudy;diff[2]=dsudz;
axis=(double**)calloc(3,sizeof(double*));

dummy1=(double*)calloc(d.Nps[zona],sizeof(double));
dummy2=(double*)calloc(d.Nps[zona],sizeof(double));

j=0; l=p.electron[zona];
while( l > 0) //Implementa la regola di Slater per il riempimento dei livelli//
{
fun=2;
if( l==1 ) fun=0.5; else if( l==2 ) fun=1.5;
eigen=eigensort[1][j];
switch ( eigensort[0][j] )
{
case +1 : min=0; mmin=0; spin=0; break;
case +2 : min=2; mmin=1; spin=0; break;
case +3 : min=4; mmin=2; spin=0; break;
case -1 : min=0; mmin=0; spin=1; break;
case -2 : min=2; mmin=1; spin=1; break;
case -3 : min=4; mmin=2; spin=1; break;
}
for(i=0;i<3;i++)
{
(diff[i])(d, (eigenfun[min+1][spin]+eigen*d.Nps[zona]),
d.nxs[zona], d.nys[zona],d.nzs[zona], dummy1 ,zona);
(diff[i])(d, (eigenfun[min][spin]+eigen*d.Nps[zona]),
d.nxs[zona], d.nys[zona],d.nzs[zona], dummy2 ,zona);
for(k=0;k<d.Nps[zona];k++)
{
punto=d.corrSP[zona][k];
mass=pow(mat[d.solido[d.ele[punto]]].me1*mat[d.solido[d.ele[punto]]].me2*
mat[d.solido[d.ele[punto]]].me3,0.3333333);
index=k+eigen*d.Nps[zona];
index2=k+i*d.Nps[zona];
Jp[index2]+=hbar*fun*(eigenfun[min][spin][index]*dummy1[k]-
eigenfun[min+1][spin][index]*dummy2[k])/mass;
}
}
l-=2; j++;
}
free(dummy1); free(dummy2); free(diff);
return;
}

//-----//

void potvect(physical_quantities p, device_mapping d, soliduzzo *mat,
double *result, int zona)
{
// Restituisce in result il potenziale vettore moltiplicato per q, //
// costituito da 2*Nps[zona] double //

double *carup,*cardown,*function;
int j,l,zona3d,punto;
double nup,ndown,dist,dummy,dv;
double epsr,masr,B;
zona3d=d.zsr[zona];
```

B. Codici per il calcolo dei potenziali di XC secondo la formulazione di Koskinen

```

    carup=dvector(0,d.nxs[zona]*d.nys[zona]-1);
    cardown=dvector(0,d.nxs[zona]*d.nys[zona]-1);
    function=dvector(0,d.Nps[zona]-1);
    B=*p.Bz;
    for(j=0;j<d.Nps[zona];j++)
    {
dv=0.0;
for(l=0;l<8;l++)
    dv+=d.dVe[d.corrSP[zona][j]][l];
dist=(d.dist[ d.corrSP[zona][j] ][5]+d.dist[ d.corrSP[zona][j] ][4])/2;
punto=d.corrSP[zona][j];
epsr=mat[d.solido[d.ele[punto]]].eps/eps0;
massr=mat[d.solido[d.ele[punto]]].me2/m0;
nup=p.ncar[0][zona3d][j]*dist/dv; ndown=p.ncar[1][zona3d][j]*dist/dv;
function[j]=(nup+ndown)*derive1(nup,ndown,B,massr,epsr);
    }

    dsudy(d,function,d.nxs[zona],d.nys[zona],d.nzs[zona],result,zona);
    dsudx(d,function,d.nxs[zona],d.nys[zona],d.nzs[zona],result+d.Nps[zona],zona);
    for(j=0;j<2*d.Nps[zona];j++)
    {
dv=0.0;
for(l=0;l<8;l++)
    dv+=d.dVe[d.corrSP[zona][j%d.Nps[zona]]][l];
dist=(d.dist[ d.corrSP[zona][j%d.Nps[zona]] ][5]+
        d.dist[ d.corrSP[zona][j%d.Nps[zona]] ][4])/2;
punto=d.corrSP[zona][j%d.Nps[zona]];
epsr=mat[d.solido[d.ele[punto]]].eps/eps0;
massr=mat[d.solido[d.ele[punto]]].me2/m0;
nup=p.ncar[0][zona3d][j%d.Nps[zona]]*dist/dv;
ndown=p.ncar[1][zona3d][j%d.Nps[zona]]*dist/dv;
dummy=result[j]/(nup+ndown)/q;
if( dummy == dummy )    //Controllo sul risultato//
{
    if (j<d.Nps[zona])
result[j]=dummy;
    else
result[j]=-dummy;
}
else
result[j]=0.0;
}
free_dvector(function,0,d.Nps[zona]-1);
return;
}

//-----//
double Exctc(double nup,double ndown, double B,double massr,double epsr)
{
    //Calcola la funzione di Exchange secondo la formulazione di Tanatar & Ceperley//
    double n,xi,fill,rs,x;
    double Ecnp,Ecp,fdixi;
    double exc;
    double rb_c;
    rb_c=rb*epsr/massr;
    n=nup+ndown;
    xi=(nup-ndown)/n;
    fill=2*pi*hbar*n/(q*B);

```

B. Codici per il calcolo dei potenziali di XC secondo la formulazione di Koskinen

```
rs=1/sqrt(pi*n)/rb_c;
x=sqrt(rs);
Ecnp=-0.3568*(1+1.13*x)/(1+1.13*x+0.9052*pow(x,2)+0.4165*pow(x,3));
Ecp=-0.0515*(1+340.5813*x)/(1+340.5813*x+75.2293*pow(x,2)+37.017*pow(x,3));
fdixi=(pow(1+xi,1.5)+pow(1-xi,1.5)-pow(2,1.5))/(2-pow(2,1.5));
exc=-4*sqrt(2)/(3*pi*rs)*(pow(1+xi,1.5)+pow(1-xi,1.5))+Ecp+(Ecnp-Ecp)*fdixi;
return ry*massr/pow(epsr,2)*exc ;
}

//-----//
double Exclwm(double nup, double ndown, double B,double massr,double epsr)
{
    //Calcola la funzione di Exchange secondo la formulazione di Levesque//
    double n,xi,fill,rs;
    double temp;
    double rb_c;
    rb_c=rb*epsr/massr;
    n=nup+ndown;
    xi=(nup-ndown)/n;
    fill=2*pi*hbar*n/(q*B);
    rs=1/sqrt(pi*n)/rb_c;
    temp=-0.782*133*2*sqrt(2)*(1-0.211*pow(fill,0.74)+0.012*pow(fill,1.7))/rs;
    return temp/(1+pow(fill,4));
}

//-----//
double ExcK(double nup,double ndown,double B, double massr, double epsr)
{
    //Calcola la funzione di Exchange secondo la formulazione di Koskinen//
    double n,xi,fill,rs;
    double temp;
    double rb_c;
    double dummy,dummy2,f1;
    rb_c=rb*epsr/massr;
    n=nup+ndown;
    xi=(nup-ndown)/n;
    fill=2*pi*hbar*n/(q*B);
    rs=1/sqrt(pi*n)/rb_c;
    f1=1.5*fill+7*pow(fill,4);
    dummy=ry*massr/pow(epsr,2)*Exctc(nup,ndown,B,massr,epsr);
    dummy2=-0.728*q*sqrt(2*pi*(nup+ndown))/(4*pi*epsr*eps0);
    return dummy2*exp(-f1)+dummy2*(1-exp(-f1));
}

//-----//
double derive(fpp p,double nup,double ndown,double B,double massr,double epsr,int tipo)
{
    //Calcola la derivata del termine di Exchange di Koskinen//
    //rispetto a nup o ndown rispettivamente se//
    //tipo == 0 o tipo == 1//
    int i;
    double a,b,c,eps,res;
    double NaNmax,NaNmin;

    c=(p)(nup,ndown,B,massr,epsr);
    i=0;
    eps=pow(10,i);
    a=b=0;
    res=0;

    while( (a-b)/c < 0.01 && i < 15 &&
(tipo == 0 && eps < nup || tipo == 1 && eps < ndown ))
```


B. Codici per il calcolo dei potenziali di XC secondo la formulazione di Koskinen

```

{
a=(p)(nup+eps*(1-tipo),ndown+eps*tipo,B,massr,epsr);
    b=(p)(nup-eps*(1-tipo),ndown-eps*tipo,B,massr,epsr);
res=(a-b)/(2*eps);
i++;
eps=pow(10,i);
}

if ( res < 0.0 || res >= 0.0 ) return res;
else { printf("There is NaN in derive\n"); return 0.0; }
}

//-----//

double derive1(double nup,double ndown,double B,double massr,double epsr)
{
    //Calcola la derivata del termine Exchange di Koskinen rispetto alla vorticit//
    double gamma,fill,Excinf;
    double fun1,fun2;
    gamma=-q*B/(massr*m0);
    fill=2*pi*hbar*(nup+ndown)/(massr*m0)/modulo(gamma);
    fun1=1.5*fill+7*pow(fill,4);
    fun2=(1.5 + 28*pow(fill,3))*exp(-fun1)*sgn(gamma)*2*pi*hbar*(nup+ndown)/
(massr*m0)/pow(gamma,2);
    Excinf=-0.782*sqrt(2*pi*(nup+ndown))*q/(4*pi*eps0*epsr);
    return ( Excinf-Exctc(nup,ndown,B,massr,epsr) )*fun2;
}

//-----//

void dsudx(device_mapping d, double *vector, int nx, int ny, int nz, double *fun, int zona)
{
    //Calcola la derivata di una funzione memorizzata sul vettore vector[]//
    // lungo la direzione x//
    int k,j,i,index;
    for(k=0;k<nz;k++)
    {
for(j=0;j<ny;j++)
{
    for(i=0;i<nx;i++)
    {
index=i+j*nx+k*nx*ny;
if ( i == nx-1 )
    fun[index]=fun[index-1];
else
fun[index]=( vector[index+1]-vector[index])/d.dist[d.corrSP[zona][index]][1];
}
}
}
return;
}

//-----//

void dsudy( device_mapping d,double *vector, int nx, int ny, int nz, double *fun, int zona)
{
    //Calcola la derivata di una funzione memorizzata sul vettore vector[]//
    // lungo la direzione y//
    int k,j,i,index;
    for(k=0;k<nz;k++)
    {
for(j=0;j<ny;j++)
{
    for(i=0;i<nx;i++)
    {

```

B. Codici per il calcolo dei potenziali di XC secondo la formulazione di Koskinen

```
index=i+j*nx+k*nx*ny;
if ( j == ny-1 )
    fun[index]=fun[index-nx];
else
    fun[index]=( vector[index+nx]-vector[index])/d.dist[d.corrSP[zona][index]][3];
}
}
return;
}

//-----//

void dsudz( device_mapping d,double *vector,int nx, int ny, int nz, double *fun,int zona)
{
    //Calcola la derivata di una funzione memorizzata sul vettore vector[]//
    //lungo la direzione z//
    int k,j,i,index;
    for(k=0;k<nz;k++)
    {
        for(j=0;j<ny;j++)
        {
            for(i=0;i<nx;i++)
            {
                index=i+j*nx+k*nx*ny;
                if ( k == nz-1 )
                    fun[index]=fun[index-nx*ny];
                else
                    fun[index]=( vector[index+nx*ny]-vector[index])/d.dist[d.corrSP[zona][index]][5];
            }
        }
    }
    return;
}

//-----//

double sgn(double num)
{
    if (num < 0)
        return -1.0;
    else
        return +1.0;
}

//-----//

double modulo(double num)
{
    if ( num < 0 )
        return -num;
    else
        return num;
}

//-----//

void dencurr2d(physical_quantities p, device_mapping d, double *Jp3d, int zona)
{
    //Trasforma una densita di corrente superficiale in una densit di//
    // corrente lineare//
    int i,comp,punto;
    double dist;
    for(comp=0;comp<3;comp++)
    for(i=0;i<d.Nps[zona];i++)
    {
        punto=d.corrSP[zona][i];
```

B. Codici per il calcolo dei potenziali di XC secondo la formulazione di Koskinen

```
    dist=(d.dist[punto][4]+d.dist[punto][5])/2;
    Jp3d[comp*d.Nps[zona]+i]=dist*Jp3d[comp*d.Nps[zona]+i];
}
    return;
}
//-----//
void Intcar(physical_quantities p, device_mapping d, int zona,
    double *carup,double *cardown)
{
    //Integra una distribuzione di carica 3D lungo la direzione z//
    int i,j,k,l;
    double cup,cdown,dist,dv;
    int zona3d=d.zsr[zona];
    int puntops,puntos;
    double dummy;
    FILE *fp=fopen("carica","w");
    for(i=0;i<d.nxs[zona];i++)
    {
for(j=0;j<d.nys[zona];j++)
{
        dv=0;
        cup=0;
        cdown=0;
        puntops=i+d.nxs[zona]*j;
        dummy=0;
        for(k=0;k<d.nzs[zona];k++)
        {
            dv=0;
            puntos=puntops+d.nxs[zona]*d.nys[zona]*k;
            for(l=0;l<8;l++)
dv+=d.dVe[d.corrSP[zona][puntos]][l];
            dist=(d.dist[d.corrSP[zona][puntos]][4]+
d.dist[d.corrSP[zona][puntos]][5])/2;
            cup+=p.ncar[0][zona3d][puntos]/dv*dist;
            cdown+=p.ncar[1][zona3d][puntos]/dv*dist;
            dummy+=dist;
        }
        carup[puntops]=cup;
        cardown[puntops]=cdown;
        fprintf(fp,"%lg      %lg\n",cup,cdown);
    }
    }
    fclose(fp);
}
```

La routine *Exck()* calcola la funzione di XC secondo la formulazione di Koskinen. Poniamo attenzione alla routine *derive()*. Essa calcola la derivata della funzione di XC rispetto a n_{\uparrow} o n_{\downarrow} a seconda che *tipo* sia uguale a 0 o 1. L'idea che sta alla base del calcolo è che data una funzione $f(x)$ calcoliamo

B. Codici per il calcolo dei potenziali di XC secondo la formulazione di Koskinen

la derivata nel modo seguente:

$$f'(x) = \lim_{\delta x \rightarrow 0} \frac{f(x + \delta x) - f(x - \delta x)}{2\delta x} \simeq \frac{f(x + \Delta x) - f(x - \Delta x)}{2\Delta x} \quad (\text{B.1})$$

La scelta di Δx è importante; infatti è limitato inferiormente dalla precisione di macchina. Definiamo γ come:

$$\gamma \mid f(x - \gamma(x)) = f(x + \gamma(x)) \quad (\text{B.2})$$

osserviamo che γ è una funzione di x . Il secondo limite è imposto dalla precisione sul calcolo della derivata. Infatti se Δx è maggiore di un certo valore, le derivate di ordine superiore al secondo non sono più trascurabili rispetto al primo. Chiamiamo con ψ questo limite, allora:

$$\gamma \leq \Delta x \leq \psi \quad (\text{B.3})$$

Elenco delle figure

1.1	Metallic Island	12
1.2	Charging Energy of QD	14
1.3	Diagramma a bande di una barriera di potenziale rettangolare	15
1.4	Diamgramma a bande di energia tra Dot e metallo.	16
1.5	Single Electron Box	17
1.6	Andamento carica netta nella MI ottenuto dall'interpolazione della fig. 5 in [10]	17
1.7	Quantum Dot accoppiato a due conduttori metallici	19
1.8	Diagramma a bande del Quantum Dot.	19
1.9	Modello a parametri concentrati del QD.	21
1.10	<i>Coulomb Staicase</i> : Andamento teorico della carica sul Dot . .	23
1.11	Single Electron Transistor	24
1.12	Diamond Diagram	25
1.13	Diamond Diagram: andamento sperimentale	26
1.14	Oscillazioni del <i>Coulomb Blockade</i>	27
1.15	28
1.16	Caratteristiche del SET	29
1.17	29
2.1	Momento angolare e momento di dipolo magnetico μ_l dell'elet- trone che gira su un'orbita circolare.	32
2.2	Esperimento di Stern-Gerlach	33
2.3	34

2.4	Diamond Diagram in presenza di Spin Blockade	35
2.5	Misura della Δ_{N-N+1} al variare del campo B	36
2.6	Effetto Zeeman sui rombi del Diamond Diagram, visibile sia sullo shift verticale che sullo shift orizzontale.	37
2.7	Zeeman Splitting nelle misure di conduttanza di un QD	37
3.1	Due elettroni sono intrappolati in un volume V	44
3.2	Funzione e_{xc}^{TC} di <i>Tanatar and Ceperley</i>	50
3.3	Funzione di e_{xc}^{LWM} di <i>Levesque et al.</i>	50
3.4	Funzione $e_{XC}^{TC,LWM}$ valida per $\nu \leq 1$ e $\nu \geq 1$	51
3.5	Potenziale $V_{XC,up}^{TC,LWM}$ ottenuto dalle formulazioni di TC e LWM	51
3.6	Potenziale $V_{XC,down}^{TC,LWM}$ ottenuto dalle formulazioni di TC e LWM	52
3.7	Funzione e_{XC}^K per il silicio dalla formulazione di <i>Koskinen et al.</i>	52
3.8	Potenziale $V_{XC,down}^K$ per il silicio dalla formulazione di <i>Koskinen</i>	53
3.9	Regola di Slater	54
4.1	Box Integration	56
4.2	57
4.3	Flusso di programma di QDCAD	60
4.4	Flusso si programma del solutore di Schrödinger	62
4.5	Suferci equienergie del Si nello spazio di K	65
5.1	Layout dello spin-quantum-dot.	69
5.2	Banda di conduzione del Quantum Dot	70
5.3	71
5.4	72
5.5	73
5.6	Andamenti del potenziale elettrochimico al variare del campo magnetico da 1 a 6 elettroni	75
5.7	76
6.1	Geometrie e drogaggi del NonOverlapped-Mos	78
6.2	81

6.3	In a é mostrato il grafico della misura della conduttanza per una struttuta MOS con larghezza di canale $W=10\mu\text{m}$ e una lunghezza $L=16\text{ nm}$. Mentre in b è riportato lo studio statistico del periodo delle oscillazioni della conduttanza.	83
6.4	Banda di conduzione del NonOverlapped Mos	84
6.5	85
6.6	86
6.7	87
6.8	88
6.9	89
6.10	90

Bibliografia

- [1] C. W. J. Beenakker. *Theory of Coulomb-blockade oscillations in the conductance of a quantum dot.* *Phys. Rev. B*, 44(4):1646, July 1990.
- [2] A. K. Hüttel et al. *Spin blockade in ground-state resonance of a quantum dot.* *Europhys. Lett.*, 62, September 2003.
- [3] Marc Sanquer et al. *Controlled Single-Electron Effects in Nonoverlapped Ultra-Short Silicon Field Effect Transistor.* *IEEE TRANSACTIONAL ON NANOTECHNOLOGY*, 2, Sep 2003.
- [4] R. Hanson et al. *Zeeman Energy and Spin Relaxation in a One-Electron Quantum Dot.* *Phys. Rev. Lett.*, 91(19), Nov 2003.
- [5] M. Allegrini G. Battignani S. Faetti. *Corso di Fisica 2.*
- [6] Gianluca Fiori. *Simulation approaches for the investigation of three-dimensional nanoscaled devices.* Feb 2005.
- [7] M. A. Kastner. *The single electron transistor and Artificial Atoms.* *Ann. Phys. (Leipzig)*, 9, Aug. 2000.
- [8] W. Kohn. *Electronic structure of matter-wave functions and density functionals.* *Rev. Mod. Phys.*, 71(5), Oct 1998.
- [9] I. O. Kulik and R. I. Shekhter. *Kinetic phenomena and charge discreteness effects in granular media.* *Zh. Eksp. Teor. Fiz.*, 41:308–316, Feb 1975.

-
- [10] Kostantin K. Likharev. *Single-Electron Device and Their Applications*. *IEEE*, 87:606, APRIL 99.
- [11] S. M. Reimann M. Koskinen M. Manninen B. R. Mottelson. *Quantum Dots in Magnetic Fields: Phase Diagram and Broken Symmetry at the Maximum-Density-Droplet Edge*. *Phys. Rev. Lett.*, 83(16), October 1999.
- [12] M. G. Pala and G. Iannaccone. *A three-dimensional solver of the Schrödinger equation in momentum space for the detailed simulation of nanostructures*. *Nanotechnology*, 13:369–372, May 2002.
- [13] S. M. Reimann and M. Manninen. *Electronic structure of quantum dots*. *Rev. Mod. Phys.*, 74(4), Oct 2002.
- [14] R. Eisberg R. Resnick. *Quantum Physics*. 1974.
- [15] B. Tanatar and D. M. Ceperley. *Ground state of the two-dimensional electron gas*. *Phys. Rev. B*, 39(8), March 1989.
- [16] D. Levesque J.J. Weis and A. H. MacDonald. *Crystallization of the incompressible quantum-fluid state of a two-dimensional electron gas in a strong magnetic field*. *Phys. Rev. B*, 30(30), July 1984.